

ECE2 y la Teoría Rigurosa de la RMN.

por

M. W. Evans y H Eckardt,
CIVIL LIST, AIAS y UPITEC

(www.webarchive.org.uk, www.aias.us, www.upitec.org, www.atomicprecision.com
www.e3tm.net)

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen.

Se evalúa el efecto sobre los espectros de Resonancia Magnética Nuclear (RMN) del descarte de la aproximación de Dirac, utilizando varios hamiltonianos de inicio. Se demuestra que el riguroso desarrollo de la teoría de la RMN posee un efecto sobre el conocido desplazamiento químico, así como sobre la órbita de espín e interacción espín-espín entre electrones y núcleos.

Palabras clave: ECE2, teoría rigurosa de la RMN, desplazamiento químico, interacción de órbita de espín y espín-espín.

1. Introducción.

En recientes documentos de esta serie [1-12] se ha iniciado la evaluación sistemática del efecto de eliminación de la aproximación de Dirac al hamiltoniano de la relatividad restringida. Se ha demostrado que la aproximación de Dirac provoca la desaparición del hamiltoniano no relativista clásico, lo cual constituye un resultado drásticamente carente de sentido físico. Sin embargo, esta aproximación se ha repetido infinitamente durante casi noventa años. Una vez eliminada, aparecen espectros novedosos y originales, y más aun, estos efectos dependen de la subjetiva selección de solución del hamiltoniano riguroso en la base $U(2)$ introducida por Dirac. Esto resulta profundamente insatisfactorio, porque se ha demostrado que las bases de la mecánica cuántica relativista son subjetivas en lugar de objetivas, como se requiere en la filosofía natural. El único camino hacia adelante es el desarrollo sistemático del tema desde un principio, a fin de intentar encontrar el método correcto de solución. En este documento, se calculan los espectros de RMN a partir de primeros principios de la nueva teoría. Esta última puede describirse esencialmente como relatividad restringida ECE2 – es decir ecuaciones que se parecen a aquella de la relatividad restringida, pero que se expresan en un espacio con torsión y curvatura esencialmente distintos de cero.

La Sección 2 es un breve resumen de cálculos detallados que pueden hallarse en las Notas de acompañamiento publicadas con el documento UFT335, en el portal de www.aias.us. Las Notas 335(1) y 335(2) consideran un hamiltoniano riguroso, constituido por el momento angular de espín de un protón y un electrón, por ejemplo en el hidrógeno atómico. El método de Landé, utilizado en la teoría del efecto anómalo de Zeeman, se adopta para este problema. En las Notas 335(3) y 335(4) se desarrolla la teoría rigurosa del desplazamiento químico, utilizando una analogía de la teoría de interacción entre el espín y la órbita. Finalmente, en la Nota 335(6), se desarrolla la teoría de interacción hiperfina rigurosa para interacción entre electrón y núcleo, entre espín y órbita y entre espín y espín en RMN. En todos los casos, el efecto de descarte de la aproximación de Dirac debiera poder medirse en espectrómetros tradicionales de RMN TF.

La Sección 3 evalúa y grafica niveles de energía de la teoría rigurosa a fin de mostrar que los espectros teóricos provenientes del enfoque riguroso difieren de aquellos obtenidos con la aproximación de Dirac.

2. Desarrollo de hamiltonianos rigurosos.

La esencia de la resonancia magnética nuclear (RMN) es que el núcleo de un átomo o molécula contiene un momento dipolar magnético:

$$\underline{\mu}_N = g_N \frac{e}{2m_p} \underline{I} \quad (1)$$

Aquí, g_N es el factor g nuclear, m_p es la masa del protón, e es el módulo de la carga en el electrón e \underline{I} es el momento angular de espín nuclear. El hamiltoniano de interacción entre el momento de dipolo magnético y la densidad de flujo magnético \underline{B} es:

$$\underline{H}_{int} = -\underline{\mu}_N \cdot \underline{B} \quad (2)$$

Como se ha mostrado en documentos inmediatamente precedentes, la interacción entre el campo magnético y el momento angular de espín \underline{S} de un electrón se obtiene en forma rigurosa de:

$$H_{int} = -2 \frac{e}{m_e} \left(\frac{\gamma^2}{1+\gamma} \right) \underline{S} \cdot \underline{B} \quad (3)$$

donde γ es el factor de Lorentz:

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

Aquí, m_e es la masa del electrón, y p_0 es su momento lineal clásico. El hamiltoniano de espín completo en el átomo más sencillo, el hidrógeno (H) es, por lo tanto:

$$H_{int} = -2 \frac{e}{m_e} \left(\frac{\gamma^2}{1+\gamma} \right) \underline{S} \cdot \underline{B} - g_N \frac{e}{m_p} \underline{I} \cdot \underline{B} \quad (5)$$

En una teoría aun más rigurosa, la parte nuclear de este hamiltoniano también se calcularía sin aproximaciones. Este tipo de hamiltoniano se describe en detalle en la Nota 335(1), junto con la condición de resonancia magnética nuclear.

En la Nota 335(2) se desarrolla con el conocido método de Landé utilizado en el efecto anómalo de Zeeman. El resultado de este método es que la Ec. (5) puede expresarse como:

$$H_{int} = -e g_M \underline{I} \cdot \underline{B} \quad (6)$$

donde:

$$g_M = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{m_e} \left(\frac{\gamma^2}{1+\gamma} \right) \left(1 + \frac{S(S+1) - I(I+1)}{M(M+1)} \right) + \frac{g_N}{m_p} \left(1 + \frac{I(I+1) - S(S+1)}{M(M+1)} \right) \right) \quad (7)$$

y donde el número cuántico M se define como:

$$M = I+S, \dots, |I-S| \quad (8)$$

El momento angular total es:

$$\underline{M} = \underline{I} + \underline{S} \quad (9)$$

Por lo tanto, la resonancia de espín electrónica se describe mediante:

$$H_{REE} = -eg_M \underline{S} \cdot \underline{B} + \dots \quad (10)$$

y la resonancia magnética nuclear mediante:

$$H_{RMN} = -eg_M \underline{I} \cdot \underline{B} + \dots \quad (11)$$

Las frecuencias de resonancia de REE y RMN son iguales:

$$\omega_{res} = eg_M B_z \quad (12)$$

y ambas se ven afectadas por el descarte de la aproximación de Dirac

La característica más importante de la RMN y la IRM es el desplazamiento químico debido a la densidad de flujo magnético generada por el momento dipolar magnético nuclear:

$$\underline{B}(\underline{m}_N) = -\frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(\underline{m}_N - 3\hat{r}\hat{r} \cdot \underline{m}_N \right) \quad (13)$$

donde μ_0 es la permeabilidad del vacío. Esta densidad de flujo magnético es equivalente al potencial vectorial nuclear:

$$\underline{A}_N = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} \underline{m}_N \times \underline{r} \quad (14)$$

En la teoría usual de la RMN, la presencia del potencial vectorial nuclear cambia el momento lineal electrónico \underline{p}_0 según la prescripción mínima:

$$\underline{p}_0 \longrightarrow \underline{p}_0 - e\underline{A}_N \quad (15)$$

de manera que el hamiltoniano habitual:

$$H = \frac{\underline{p}_0^2}{2m} + U \quad (16)$$

se cambia a:

$$H = \frac{1}{2m} (\underline{p}_0 - e\underline{A}_N) \cdot (\underline{p}_0 - e\underline{A}_N) + U \quad (17)$$

donde U es el potencial de Coulomb entre el electrón y el núcleo. Como se muestra en detalle en la Nota 335(3), el hamiltoniano de interacción:

$$H_{int} = - \frac{e}{m_e} \underline{P}_0 \cdot \underline{A}_{-N} + \dots \quad (18)$$

da la energía de interacción:

$$E = - \int \underline{A}_{-N} \cdot \underline{j} d\tau \quad (19)$$

donde la densidad de corriente es:

$$\underline{j} = \frac{e}{2m_e} (\psi^* \underline{P}_0 \psi + \psi \underline{P}_0^* \psi^*) \quad (20)$$

Utilizando la Ec. (2) esta energía de interacción es:

$$E = - \underline{\mu}_N \cdot \underline{B}_{-N} = - \int \underline{A}_{-N} \cdot \underline{j} d\tau \quad (21)$$

y es responsable del desplazamiento químico. Esto es porque la densidad de flujo magnético \underline{B}_N está presente, además de la densidad de flujo magnético aplicada del espectrómetro de RMN.

Los desplazamientos químicos de toda clase se ven afectados por la eliminación de la aproximación de Dirac. En el hamiltoniano de clase uno, esta eliminación de la aproximación sin sentido físico se representa mediante:

$$\frac{P_0^2}{2m_e} \rightarrow \frac{P_0^2}{2m_e} \left(\frac{\gamma^2}{1+\gamma} \right) \quad (22)$$

La teoría se desarrolla más a fondo en las Notas 335(4) y 335(5). En ausencia de cualquier consideración del potencial vectorial nuclear, el hamiltoniano riguroso de clase uno en la base O(3) es:

$$H_0 = H - m_e c^2 = \frac{1}{m_e} \left(\frac{\gamma^2}{1+\gamma} \right) P_0^2 + U \quad (23)$$

donde

$$U = - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (24)$$

En presencia de un potencial vectorial nuclear \underline{A}_N el hamiltoniano se cambia por la prescripción mínima y, como se muestra en la Nota 335(4), el hamiltoniano de interacción deviene:

$$H_{int} = -2 \frac{e}{m_e} \underline{P}_i \cdot \underline{P}_N \quad (25)$$

donde

$$\underline{P}_1 = \left(\gamma^2 / (1 + \gamma) \right)^{1/2} \underline{P}_0 \quad (26)$$

$$\underline{P}_N = e \underline{A}_N \quad (27)$$

La densidad de flujo magnético nuclear puede definirse como:

$$\underline{B}_N = \frac{\mu_0 e}{2\pi m_e r^3} \underline{L} \quad (28)$$

donde:

$$\underline{L} = \underline{r} \times \underline{P}_1 \quad (29)$$

es un momento angular orbital del electron. En presencia el campo magnético externo \underline{B} del espectrómetro de RMN, el hamiltoniano de transición complete es:

$$\underline{H}_{int} = - \underline{M}_N \cdot (\underline{B} + \underline{B}_N) \quad (30)$$

En formato de órbita de espín (Nota 335(4)):

$$\underline{H}_{int} = - \frac{g_N \mu_0 e^2}{4\pi m_e m_p r^3} \left(\frac{\gamma^2}{1 + \gamma} \right)^{1/2} \underline{I} \cdot \underline{L} \quad (31)$$

donde \underline{I} es el momento angular de espín del núcleo y \underline{L} es el momento angular orbital del electrón. En el átomo de H hay solamente un electrón y un protón.

En analogía directa con la teoría de órbita de espín habitual de los electrones, los niveles de energía vienen dados por los valores esperados, como sigue:

$$E_{int} = - \frac{g_N \mu_0 e^2}{4\pi m_e m_p} \left\langle \left(\frac{\gamma^2}{1 + \gamma} \right)^{1/2} \frac{\underline{I} \cdot \underline{L}}{r^3} \right\rangle \quad (32)$$

Supongamos ahora que esto puede expresarse como:

$$E_{int} = - \frac{g_N \mu_0 e^2}{4\pi m_e m_p} \left(\frac{\gamma^2}{1 + \gamma} \right)^{1/2} \left\langle \frac{\underline{I} \cdot \underline{L}}{r^3} \right\rangle \quad (33)$$

utilizando valores esperados para dar:

$$A = \frac{\gamma^2}{1+\gamma} = \left(1 - \left(\frac{\alpha}{n} \right)^2 + \left(1 - \left(\frac{\alpha}{n} \right)^2 \right)^{1/2} \right)^{-1} \quad (34)$$

como en documentos inmediatamente precedentes. Aquí, α es la constante de estructura fina y n el el número cuántico principal del átomo de H. Las funciones de onda hidrogenicas se han utilizado en primera aproximación como en trabajos anteriores. Por analogía con la teoría de órbita de espín de los electrones:

$$\left\langle \frac{\underline{I} \cdot \underline{L}}{r^3} \right\rangle = \frac{\hbar^2}{2a_0^3 n^3} \frac{J(J+1) - L(L+1) - I(I+1)}{L(L+1/2)(L+1)} \quad (35)$$

donde a_0 es el radio de Bohr y donde los números cuánticos se definen mediante la serie de Clebsch Gordan:

$$J = L+I, \dots, |L-I|. \quad (36)$$

Para el proton del núcleo del átomo de H:

$$I = \frac{1}{2} \text{ ó } -\frac{1}{2}. \quad (37)$$

En presencia de un campo magnético externo, el hamiltoniano complete es:

$$\begin{aligned} H &= -m_N \cdot \underline{B} + E_{int} \\ &= -g_N e \hbar m_I B_z / (2m_p) + E_{int} \end{aligned} \quad (38)$$

donde la energía de interacción es:

$$E_{int} = \frac{-g_N \mu_N e^2 A^{1/2} \hbar^2}{4\pi m_e m_p} \frac{J(J+1) - L(L+1) - I(I+1)}{2a_0^3 n^3 L(L+1/2)(L+1)} \quad (39)$$

La condición de resonancia de la RMN es:

$$\hbar \omega = E(m_I - 1) - E(m_I) \quad (40)$$

de manera que resulta claro que el espectro íntegro se ve afectado por el factor:

$$A = \frac{\gamma^2}{1+\gamma} \quad (41)$$

Este efecto se encuentra dentro del rango de un espectrómetro de RMN TF ordinario.

Finalmente en esta sección, se muestra que la conocida teoría de interacción hiperfina en RMN cambia a un nivel fundacional cuando se elimina la aproximación de Dirac.

La estructura hiperfina en RMN se genera por la interacción del momento dipolar de espín magnético de un electrón con el campo magnético nuclear debido al momento angular de espín \underline{I} del núcleo. En la aproximación de Dirac, el momento dipolar de espín magnético de un electrón es:

$$\underline{m}_s = \frac{e}{m_e} \underline{S} \quad (42)$$

pero la definición rigurosa (ver documentos y notas precedentes) es:

$$\underline{m}_s = 2 \left(\frac{\gamma^2}{1+\gamma} \right) \frac{e}{m_e} \underline{S} \quad (43)$$

El momento dipolar de espín magnético nuclear es:

$$\underline{m}_N = g_N \frac{e}{m_p} \underline{I} \quad (44)$$

donde g_N es el factor g nuclear y m_p es la masa del protón del H atómico, donde el núcleo consiste de un protón. En una teoría completamente rigurosa, \underline{m}_N también debe de corregirse por la eliminación de la aproximación de Dirac, pero en primera aproximación se utiliza la definición (44).

La densidad de flujo magnético nuclear es:

$$\underline{B}(\underline{I}) = -\frac{\mu_0}{4\pi r^3} \left(\underline{m}_N - 3 \hat{r} \hat{r} \cdot \underline{m}_N \right) \quad (45)$$

por lo tanto, el hamiltoniano de interacción es:

$$H_{int} = \left(\frac{\gamma^2}{1+\gamma} \right) \frac{\mu_0 e^2 g_N}{4\pi m_e m_p r^3} \left(\underline{S} \cdot \underline{I} - 3 \underline{S} \cdot \hat{r} \hat{r} \cdot \underline{I} \right) \quad (46)$$

y la conocida estructura hiperfina de la RMN se ve modificada por el factor (41). Habitualmente la teoría se simplifica mediante la alineación de los dos dipolos de espín con la fuerte densidad de flujo magnético externa de un espectrómetro de RMN, de manera que se reduce a:

$$H_{int} \psi = \frac{A \mu_0 e g_I^2 h^2}{4\pi m_e m_p} \left(\frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{r^3} \right) m_I m_S \psi \quad (47)$$

Por lo tanto, los niveles de energía son los dados en la Nota 335(6):

$$E_{int} = \frac{A \mu_0 e g_I^2 h^2}{4\pi m_e m_p} m_I m_S \int \psi^* \left(\frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{r^3} \right) \psi d\tau \quad (48)$$

y la frecuencia de resonancia de RMN es:

$$\omega_{RMN} = \frac{A \mu_0 e g_I^2 h^2}{8\pi m_e m_p} \int \psi^* \left(\frac{1 - 3 \cos^2 \theta}{r^3} \right) \psi d\tau \quad (49)$$

tal como se calculó en la Nota 335(6).

La eliminación de la aproximación de Dirac produce el desplazamiento:

$$\omega_{RMN} \longrightarrow A \omega_{RMN} \quad (50)$$

es el espectro hiperfino, y esto es observable en un espectrómetro de RMN TF.

3. Análisis gráfico y computacional.

En la Ec.(34), el factor A que corrige el valor esperado de la energía de interacción de RMN (30) viene dado por

$$A = \frac{\gamma^2}{1 + \gamma^2} = \frac{1}{1 - \left(\frac{\alpha}{n}\right)^2 + \sqrt{1 - \left(\frac{\alpha}{n}\right)^2}} \quad (51)$$

con la constante de estructura fina α y número cuántico principal n . La función $A(n)$ se ha representado gráficamente en la Fig. 1 para un valor continuamente extendido de n . La función desciende a 1/2 de una manera hiperbólica. Lo mismo sucede con $\sqrt{A}(n)$ (no mostrado en la gráfica). La corrección para $n = 1$ es de aproximadamente 0.2 % para A y 0.14 % para \sqrt{A} , respectivamente. Se obtiene la misma corrección para la energía de diferencia (40), que es la frecuencia de resonancia para RMN. Por lo tanto, se esperaría que todos los espectros de RMN del hidrógeno debieran de corregirse por esta cantidad.

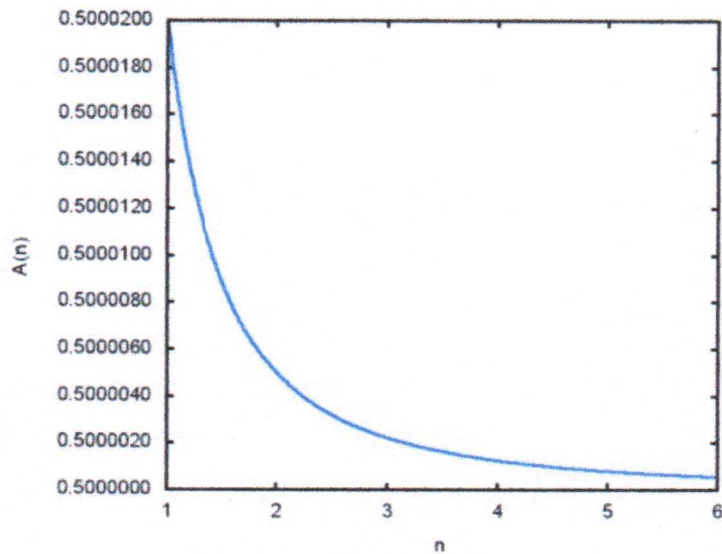


Figura 1: Factor de corrección $A(n)$ para el hidrógeno atómico.

Agradecimientos.

Se agradece al Gobierno Británico por el otorgamiento de la Pensión Civil Vitalicia y al equipo técnico de AIAS / UPITEC y otros por muchas discusiones interesantes. Se agradece a Dave Burleigh por el mantenimiento al portal, su publicación y la programación de retroalimentación, a Alex Hill por las traducciones y las lecturas, y a Robert Cheshire por las lecturas.

Referencias bibliográficas.

- [1] M. W. Evans, H. Eckardt, D. W. Lindstrom y S. J. Crothers, "The Principles of ECE Theory" (UFT281 - UFT288 y en la sección en castellano, New Generation, 2016 en prep.).
- [2] M. W. Evans, S. J. Crothers, H. Eckardt y K. Pendergast, "Criticisms of the Einstein Field Equation" (Cambridge International, CISP, 2010, y UFT301).
- [3] F. Felker, "The Evans Equations of Unified Field Theory" (Abramis 2007 y UFT302, traducido al castellano por Alex Hill en el portal www.aias.us).
- [4] H. Eckardt, "The ECE Engineering Model" (UFT303). Hay traducción al castellano en el mismo portal www.aias.us.

- [5] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, "Generally Covariant Unified Field Theory" (Abramis 2005 a 2011 en siete volúmenes y en el portal www.aias.us).
- [6] M. W. Evans, "Collected Scientometrics" (UFT307 y New Generation, Londres, 2015, también en la sección Filtered Statistics del portal www.aias.us).
- [7] M. W. Evans, Ed., J. Found. Phys. Chem. (CISP 2011 y de libre acceso en el portal www.aias.us)
- [8] M. W. Evans Ed., edición edpecial de la ref. (7), "Definitive Refutations of the Einsteinian General Relativity" (CISP 2012 y de libre acceso en el portal www.aias.us).
- [9] M. W. Evans y L. B. Crowell, "Classical and Quantum Electrodynamics and the B(3) Field" (World Scientific 2001 y de libre acceso en la sección Omnia Opera del 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 dos ediciones y seis volúmenes.
- [11] M. W. Evans y J.-P. Vigiér "The Enigmatic Photon" (Kluwer 1994 a 2002 y de libre acceso en la sección Omnia Opera), en cinco volúmenes con encuadernación dura y blanda.
- [12] M. W. Evans y A. A. Hasanein, "The Photomagnetron in Quantum Field Theory" (World Scientific, 1994).