

Soluciones de la Ecuación del Fermión para el hidrógeno atómico y helio: deducción del principio de exclusión de Pauli.

por

M. W. Evans,

Civil List.

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

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net).

Resumen.

Se resuelve la ecuación del fermión para los espectros del hidrógeno atómico y del helio. Se muestra que las funciones de onda para el hidrógeno deben de ser combinaciones de funciones de onda del espín hacia arriba y del espín hacia abajo, un resultado que es compatible con las transformaciones fundamentales de Lorentz de los espinotensores derecho e izquierdo de Pauli. Se presenta un resumen de las propiedades relevantes de los operadores y se establece notación *ket* para una mayor claridad. La estructura fina del hidrógeno atómico emerge en forma directa a partir de la parte angular de las funciones de onda y del término de acoplamiento de la órbita del espín. Se incluye un resumen de la solución para el hidrógeno, para una mayor facilidad de referencia, y se deduce el Principio de Exclusión de Pauli a partir de un empleo directo de la inversión de paridad aplicada a la función de onda completa del helio.

Palabras clave: Teoría ECE, ecuación del fermión, átomos de hidrógeno y helio, Principio de Exclusión de Pauli.

1. Introducción.

En los dos documentos precedentes de esta serie [1–10] se ha deducido y desarrollado la primera ecuación del fermión en la física para una partícula aislada. Se le ha denominado "ecuación del fermión" para distinguirlo de la ecuación de Dirac. La ecuación del fermión posee múltiples ventajas, las cuales se están desarrollando en forma sistemática [11]. Especialmente, la ecuación del fermión elimina la noción incorrecta de la "energía negativa" de la física y, por lo tanto, elimina la necesidad de una interpretación de múltiples fermiones [12] de la ecuación de Dirac. Se ha demostrado en los documentos UFT 172 y 173(www.aias.us) que la ecuación del fermión es una expresión en una única ecuación diferencial de primer orden de las dos importantes y fundamentales transformaciones del Lorentz de los espinotensores de Pauli derecho e izquierdo [12]. La ecuación del fermión recibe preferencia respecto de la ecuación de Dirac a partir de la Navaja de Ochham (Principio de Simplicidad), porque expresa el campo del fermión en términos de las matrices de Pauli de 2×2 y produce rigurosamente una energía no negativa. Se ha demostrado que el origen de la falacia de la energía negativa en la física se debe a la elección incorrecta de Dirac de sus matrices gamma de 4×4 - la "representación tradicional". Este error se ha venido repitiendo en forma dogmática durante 85 años, y ha dado como resultado desarrollos matemáticos muy elaborados en teoría de campo cuántico y en electrodinámica cuántica. Mediante la Navaja de Ockham, la ecuación del fermión vuelve innecesarias esta serie de complicaciones.

En la Sección 2 se da un resumen, para facilidad de referencia, de las propiedades de los operadores utilizados en este documento. En la Sección 3, se dan detalles acerca de la solución de la ecuación del fermión para el H atómico, y se adopta notación clave para una mayor claridad. Se ofrecen algunos detalles de cómo emerge la mecánica cuántica no relativista como un límite de la teoría relativista. En la Sección 4 se deduce la estructura espectral fina del átomo de H mediante una consideración directa de la parte angular de la función de onda y el término de órbita de espín del hamiltoniano. Finalmente, en la Sección 5, se deduce el Principio de Exclusión de Pauli en forma directa utilizando como ejemplo el átomo de helio. El origen fundamental del principio es el hecho de que las funciones de onda del hidrógeno deben ser combinaciones de estados de espín hacia arriba y hacia abajo, una conclusión que emerge a partir de la ecuación del fermión pero que no se obtiene a partir de la ecuación de Dirac.

2. Resumen de las propiedades de los operadores.

El operador básico en la mecánica cuántica relativista [13, 14] es:

$$\hat{\kappa} = \begin{bmatrix} \hat{\sigma} \cdot \hat{L} + \hbar & 0 \\ 0 & -\hat{\sigma} \cdot \hat{L} - \hbar \end{bmatrix} \quad (1)$$

donde $\hat{\sigma}$ se considera en sí mismo como un operador [13]. Aquí \hat{L} es el operador del momento orbital angular y \hbar es la constante reducida de Planck con dimensiones de momento angular. Así:

$$\hat{\kappa} \psi = -\kappa \hbar \psi \quad , \quad \kappa = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right) \quad (2)$$

El cuadrado de este operador se define mediante:

$$\hat{\kappa}^2 = (\hat{\sigma} \cdot \hat{L} + \hbar)^2 = \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \hat{\sigma} \cdot \hat{L} + 2 \hbar \hat{\sigma} \cdot \hat{L} + \hbar^2 \quad . \quad (3)$$

A partir del álgebra de las matrices de Pauli:

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{L} \hat{\sigma} \cdot \hat{L} = \hat{L}^2 + i \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \times \hat{L} \quad . \quad (4)$$

El producto cruzado de los operadores vectoriales en el segundo término es distinto de cero por la siguiente razón. Las ecuaciones básicas del conmutador son:

$$\left[\hat{L}_X, \hat{L}_Y \right] = i \hbar \hat{L}_Z \quad (5)$$

et cyclicum

que en notación de operador vectorial [14] son:

$$\hat{L} \times \hat{L} = i \hbar \hat{L} \quad . \quad (6)$$

Por lo tanto:

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{L} \hat{\sigma} \cdot \hat{L} = \hat{L}^2 - \hbar \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \quad . \quad (7)$$

A partir de la Ec. (7) en la Ec. (3):

$$\hat{\kappa}^2 = \hat{L}^2 + \hbar \hat{\sigma} \cdot \hat{L} + \hbar^2 \quad . \quad (8)$$

Tal como en el documento UFT 173 y en la referencia [13]:

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{L} \varphi^R = \hbar \left(j - \frac{1}{2} \right) \varphi^R \quad (9)$$

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{L} \varphi^L = - \hbar \left(j + \frac{3}{2} \right) \varphi^L \quad . \quad (10)$$

donde φ^R y φ^L son los espinotensores derecho e izquierdo de Pauli:

$$\Phi^R = \begin{bmatrix} \psi_1^R \\ \psi_2^R \end{bmatrix} \quad , \quad \Phi^L = \begin{bmatrix} \psi_1^L \\ \psi_2^L \end{bmatrix} \quad . \quad (11)$$

El operador de momento angular total es:

$$\hat{J} = \hat{L} + \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma} = \hat{L} + \hat{S} \quad . \quad (12)$$

Esta ecuación surgió originalmente [13, 14] a partir de una sugerencia empírica de que medio espín explicaba muchas características de los espectros atómicos. El operador de momento

angular de espín intrínseco se define como:

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{1}{2} \hbar \hat{\boldsymbol{\sigma}} . \quad (13)$$

Por lo tanto, el cuadrado del operador de momento angular total es:

$$\begin{aligned} \hat{j}^2 &= \hat{L}^2 + \hbar \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{\hbar^2}{4} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \\ &= \hat{L}^2 + \hbar \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{3}{4} \hbar^2 \\ &= \hat{L}^2 + 2 \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{S}} , \end{aligned} \quad (14)$$

en donde se ha utilizado el resultado [12]:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = 3 . \quad (15)$$

Por lo tanto:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{bmatrix} 1 & 1-i \\ 1+i & -1 \end{bmatrix} . \quad (16)$$

Por lo tanto:

$$\hat{L}^2 \Phi^R = \hbar^2 l_- (l_- + 1) \Phi^R , \quad (17)$$

$$\hat{L}^2 \Phi^L = \hbar^2 l_+ (l_+ + 1) \Phi^L \quad (18)$$

donde:

$$l_{\pm} = j \pm \frac{1}{2} . \quad (19)$$

Consideremos ahora la identidad de operador [13]:

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} + i \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{r} \right) \quad (20)$$

en coordenadas radiales, y construyamos el cuadrado:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} - \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{r^2} + i \left(\frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{r} + \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{r} \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} \right) . \quad (21)$$

La parte real de esta ecuación es:

$$\text{Re} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} - \frac{\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}}}{r^2} \quad (22)$$

donde utilizamos:

$$\hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} = 1 \quad . \quad (23)$$

Ahora utilizamos:

$$\frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{r}}{r} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (24)$$

para hallar:

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\hat{L}^2}{r^2} + \frac{\hbar}{r^2} \hat{\sigma} \cdot \hat{L} \quad . \quad (25)$$

Sin embargo, sabemos que:

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \hat{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \hat{p}^2 = -\hbar^2 \nabla^2 \quad (26)$$

de manera que obtenemos la identidad de operador:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} - \frac{\hat{\sigma} \cdot \hat{L}}{\hbar r^2} \quad . \quad (27)$$

Para dejar claro que estas son todas ecuaciones de operadores, se ha colocado el símbolo $\hat{}$ sobre todos los operadores.

Puede desarrollarse la estructura fina del H atómico [14] en forma directa utilizando la ecuación del operador:

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2 \hat{L} \cdot \hat{S} \quad (28)$$

Los niveles de energía del acoplamiento orbital de espín vienen dados [14] por:

$$\hat{L} \cdot \hat{S} \psi = \frac{1}{2} (\hat{J}^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) \psi \quad , \quad (29)$$

de manera que los niveles de energía son:

$$E = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \langle \psi^* | \xi(r) | \psi \rangle \quad (30)$$

donde ξ se define en la siguiente sección.

3. Solución de la Ecuación del Fermión para el H.

La ecuación del fermión produce las transformaciones correctas de Lorentz de los espinotensores derecho e izquierdo de Pauli, en tanto que la ecuación de Dirac no lo logra. La ecuación del fermión es, por lo tanto, la ecuación correcta en física. La ecuación del fermión puede expresarse como:

$$(\hat{E} - e\Phi + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \phi^L = mc^2 \phi^R \quad (31)$$

$$(\hat{E} - e\Phi - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}}) \phi^R = mc^2 \phi^L \quad (32)$$

donde la prescripción mínima se ha utilizado para describir el efecto del potencial de Coulomb del átomo de H:

$$E \longrightarrow E - e\varphi . \quad (33)$$

Aquí E es la energía total relativista, $-e$ es la carga del electrón, φ es el potencial de Coulomb, m es la masa del electrón y c es la velocidad de la luz en el vacío. Bajo la transformación de Lorentz [12]:

$$\phi^R \longrightarrow \exp\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Phi}\right) \phi^R , \quad (34)$$

$$\phi^L \longrightarrow \exp\left(-\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Phi}\right) \phi^L , \quad (35)$$

donde $\boldsymbol{\Phi}$ denota un ángulo vectorial. Existen dos transformaciones fundamentales de Lorentz [12] porque la teoría de grupos subyacente es descrita por el grupo de Lorentz extendida por paridad. Esta última posee el efecto:

$$\hat{P}(\phi^R) = \phi^L , \quad (36)$$

$$\hat{P}(\phi^L) = \phi^R . \quad (37)$$

Resulta claro y sencillo observar que la energía en reposo:

$$E_0 = mc^2 \quad (38)$$

es siempre positiva, y las Ecs. (31) y (32) se inter-convierten por paridad porque:

$$\hat{P}(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}}) = -\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{p}} . \quad (39)$$

Los niveles de energía del átomo de H se hallan mediante la resolución simultánea de las Ecs. (31) y (32). El problema básico [13] es el de resolver:

$$\left(\hat{L}^2 + \hbar \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\mathbf{L}} + \frac{3}{4} \hbar^2\right) \begin{bmatrix} \phi^R \\ \phi^L \end{bmatrix} = j(j+1)\hbar^2 \begin{bmatrix} \phi^R \\ \phi^L \end{bmatrix} \quad (40)$$

y

$$(\hat{L}_Z + \frac{1}{2} \hbar \hat{\sigma}_Z) \begin{bmatrix} \Phi^R \\ \Phi^L \end{bmatrix} = m \hbar \begin{bmatrix} \Phi^R \\ \Phi^L \end{bmatrix} . \quad (41)$$

Hay presentes dos momentos angulares, el orbital y el momento angular de espín del electrón. Los estados permitidos [14] del momento angular total vienen dados por la serie de Clebsch Gordan:

$$j = j_1 + j_2 , \dots , |j_1 - j_2| , \quad (42)$$

$$m_j = m_{j1} + m_{j2} . \quad (43)$$

Cuando:

$$j_2 = \frac{1}{2} \quad (44)$$

entonces:

$$j = l + \frac{1}{2} \quad \text{ó} \quad j = l - \frac{1}{2} . \quad (45)$$

El estado del sistema se define mediante la notación clave [14], la cual se relaciona con la notación utilizada por Merzbacher [13] como sigue:

$$|j m_j l_+ \rangle = Y_{j+\frac{1}{2}}^{jm} , \quad (46)$$

$$|j m_j l_- \rangle = Y_{j-\frac{1}{2}}^{jm} . \quad (47)$$

Aquí:

$$l_{\pm} = j \pm \frac{1}{2} . \quad (48)$$

Utilizando la ecuación del operador (14) resulta [14]:

$$\hat{L} \cdot \hat{S} |j m_j l \rangle = \frac{1}{2} \hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) |j m_j l \rangle \quad (49)$$

donde j , l y s son números cuánticos. Resulta entonces a partir de las Ecs. (19) y (45) que:

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{L} |j m_j l_+ \rangle = -(l_+ + 1) |j m_j l_+ \rangle , \quad (50)$$

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{L} |j m_j l_- \rangle = l_- |j m_j l_- \rangle . \quad (51)$$

La siguiente relación de operadores viene dada [13] por consideraciones de paridad, ya que este operador es un pseudoescalar:

$$\hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} |j m_j l_{\pm} \rangle = - |j m_j l_{\mp} \rangle . \quad (52)$$

Más aún, este operador tiene los efectos de inversión de paridad:

$$\hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{\partial}{\partial r} = - \frac{\partial}{\partial r} \quad , \quad \hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \frac{1}{r} = - \frac{1}{r} . \quad (53)$$

Resulta claro de que los espinotensores Φ^R y Φ^L son las funciones de onda significativas porque obedecen la transformación de Lorentz y vienen dadas por consideraciones significativas [12] de teoría de grupos, y, más importante aún, porque dan energías en reposo positivas. Con el objeto de resolver las ecuaciones (31) y (32) se utilizan las siguientes transformaciones matemáticas:

$$\Phi^L \longrightarrow \Phi_S^R + \Phi_S^L , \quad (54)$$

$$\Phi^R \longrightarrow \Phi_S^R - \Phi_S^L . \quad (55)$$

En notación *ket*, las soluciones deben poseer el formato [13]:

$$\Phi_S^R = |j m_j l_- \rangle , \quad \Phi_S^L = |j m_j l_+ \rangle \quad (56)$$

de manera que:

$$\Phi^R = |j m_j l_- \rangle - |j m_j l_+ \rangle \quad (57)$$

$$\Phi^L = |j m_j l_- \rangle + |j m_j l_+ \rangle \quad (58)$$

con la normalización:

$$\int \Phi_S^+ \Phi_S d^3x = 1 . \quad (59)$$

En esta notación:

$$\Phi_S = \begin{bmatrix} \Phi_S^R \\ \Phi_S^L \end{bmatrix} , \quad (60)$$

y:

$$\Phi_S^+ = \left[\Phi_S^{R*} , \Phi_S^{L*} \right] \quad (61)$$

de manera que:

$$\int (\psi_{S1}^{R*} \psi_{S1}^R + \dots + \psi_{S1}^{L*} \psi_{S1}^L) d^3x = 1 \quad . \quad (62)$$

A partir de estas consideraciones:

$$\psi_1^R = \psi_1^R(r) (|j m_j L_- \rangle - |j m_j L_+ \rangle) \quad , \quad (63)$$

$$\psi_2^R = \psi_2^R(r) (|j m_j L_- \rangle - |j m_j L_+ \rangle) \quad , \quad (64)$$

$$\psi_1^L = \psi_1^L(r) (|j m_j L_- \rangle + |j m_j L_+ \rangle) \quad , \quad (65)$$

$$\psi_2^L = \psi_2^L(r) (|j m_j L_- \rangle + |j m_j L_+ \rangle) \quad . \quad (66)$$

Se ha obtenido el resultado de importancia fundamental que, con el objeto de que se cumplan correctamente las transformaciones de Lorentz (34) y (35), las funciones de onda del H deben de ser las combinaciones (63) a (66). Estas son combinaciones de diferentes estados de espín del electrón. El hecho de que la energía en la naturaleza es siempre positiva implica estas combinaciones y viceversa. La eigenfunción para $\hat{L} \cdot \hat{S}$ es siempre la ecuación (49), dando los niveles de energía del átomo de H como en la Sección 4.

Las transformaciones (54) y (55) conducen a:

$$(\hat{E} - e\varphi - m c^2)\Phi_S^R + c \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \Phi_S^L = 0 \quad (67)$$

$$(\hat{E} - e\varphi + m c^2)\Phi_S^L + c \boldsymbol{\sigma} \cdot \hat{\mathbf{p}} \Phi_S^R = 0 \quad . \quad (68)$$

La aplicación de la inversión de paridad deja a estas ecuaciones sin cambio, porque:

$$\hat{P} (\Phi_S^R) = \Phi_S^R \quad , \quad \hat{P} (\Phi_S^L) = -\Phi_S^L \quad . \quad (69)$$

En contraste, la paridad inter-convierte a las Ecs. (31) y (32). Estas consideraciones significan que las Ecs. (67) y (68) están incompletas, ya que no dicen nada acerca de la paridad. La ecuación de Dirac simplemente es una combinación de las ecuaciones incompletas (67) y (68), una combinación que utiliza las matrices de Dirac de 4 x 4 en la representación tradicional [12]. El error cometido por Dirac, y repetido desde entonces, fue el afirmar que el signo negativo en la Ec. (67) significa “energía negativa”, cuando en realidad no posee significado físico. Las ecuaciones correctas (31) y (32) conservan el signo positivo. La ecuación del fermión es una combinación de las Ecs. (31) y (32), una combinación construida únicamente con matrices de Pauli. No hay necesidad de las matrices de Dirac en física, y ciertamente no hay necesidad de “energía negativa”.

Para el átomo de H, las Ecs. (67) y (68) transformadas poseen una solución semi-analítica como sigue. Sin embargo, esta solución debe de considerarse como una solución de las ecuaciones correctas (31) y (32). La importancia de las transformaciones (54) y (55) es que las funciones de onda físicas Φ^R y Φ^L deben de ser combinaciones de diferentes estados de espín. La ecuación de Dirac no genera este resultado de importancia fundamental. Por inspección [13] las soluciones deben de adoptar el formato:

$$\Phi_S^R = F |j m_j l_- \rangle \quad , \quad \Phi_S^L = -i f |j m_j l_+ \rangle \quad , \quad (70)$$

Donde se ha introducido el término $-i$ con el objeto de dar dos ecuaciones simultáneas reales en una etapa posterior del cálculo. En estas ecuaciones:

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{p} = \sigma \cdot \frac{\hat{r}}{r} \left(-i \hbar \frac{\partial}{\partial r} + i \frac{\hat{\sigma} \cdot \hat{L}}{r} \right) \quad (71)$$

con:

$$\sigma \cdot \frac{\hat{r}}{r} |j m_j l_{\mp} \rangle = - |j m_j l_{\pm} \rangle \quad (72)$$

y:

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{L} |j m_j l \rangle = \hbar (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) |j m_j l \rangle \quad (73)$$

donde:

$$l_{\pm} = j \pm \frac{1}{2} \quad . \quad (74)$$

Como se demuestra en la siguiente sección, la estructura fina del átomo de H se obtiene en forma completa sólo por consideraciones de la Ec. (73) [14], de manera que resulta de inmediato que la estructura fina viene dada por la ecuación del fermión con la principal ventaja de que mantiene la energía positiva.

Este resultado queda subrayado por la Ec. (71), que da:

$$c \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \Phi_S^R = -i \hbar c \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{j - \frac{1}{2}}{r} \right) F |j m l_+ \rangle \quad , \quad (75)$$

$$c \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \Phi_S^L = -\hbar c \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{j + \frac{3}{2}}{r} \right) f |j m l_- \rangle \quad . \quad (76)$$

De manera que las Ecs.(67) y (68) devienen ecuaciones diferenciales simultáneas en f y F :

$$(\hat{E} - e \varphi - m c^2)F - \hbar c \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{j + \frac{3}{2}}{r} \right) f = 0 \quad , \quad (77)$$

$$(\hat{E} - e\varphi + mc^2)f + \hbar c \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{j - \frac{1}{2}}{r} \right) F = 0 . \quad (78)$$

que pueden resolverse con alguna aproximación [13] para dar E , los niveles de energía del átomo de H. Los detalles del resultado se incluyen en la nota acompañante 174(2) y son bien conocidos [13]. Esta solución es claramente una solución de la ecuación del fermión, que da toda la estructura fina del espectro del H, excepto el corrimiento de Lamb.

Para deducir las Ecs. (77) y (78) utilizamos:

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{L} |j m l_-\rangle = (j - \frac{1}{2}) |j m l_-\rangle , \quad (79)$$

$$\hat{\sigma} \cdot \hat{L} |j m l_+\rangle = - (j + \frac{3}{2}) |j m l_+\rangle . \quad (80)$$

y notamos que:

$$\left(\hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \frac{\partial}{\partial r} = - \frac{\partial}{\partial r} , \quad \left(\hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \right) \frac{1}{r} = - \frac{1}{r} \quad (81)$$

debido a paridad. Por lo tanto:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \Phi_S^R &= \hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \left(-i \hbar \frac{\partial}{\partial r} + i \frac{\hat{\sigma} \cdot \hat{L}}{r} \right) F |j m l_-\rangle \\ &= -i \hbar \frac{\partial F}{\partial r} |j m l_+\rangle + i \hbar \frac{(j - \frac{1}{2})}{r} F |j m l_+\rangle \\ &= -i \hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} - \left(\frac{j - \frac{1}{2}}{r} \right) \right) F |j m l_+\rangle \end{aligned} \quad (82)$$

que es la Ec. (75). Análogamente:

$$\begin{aligned} \hat{\sigma} \cdot \hat{p} \Phi_S^L &= -i \hat{\sigma} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r} \left(-i \hbar \frac{\partial}{\partial r} + i \frac{\hat{\sigma} \cdot \hat{L}}{r} \right) f |j m l_+\rangle \\ &= -\hbar \frac{\partial f}{\partial r} |j m l_-\rangle - \hbar \frac{(j + \frac{3}{2})}{r} f |j m l_-\rangle \\ &= -\hbar \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{(j + \frac{3}{2})}{r} \right) f |j m l_-\rangle \end{aligned} \quad (83)$$

que es la Ec. (76). Las funciones de onda completas del H son las combinaciones:

$$\Phi^L = \Phi_S^R + \Phi_S^L = F |j m_j l_- \rangle - i f |j m_j l_+ \rangle \quad (84)$$

y

$$\Phi^R = \Phi_S^R - \Phi_S^L = F |j m_j l_- \rangle + i f |j m_j l_+ \rangle \quad (85)$$

Estas combinaciones pueden expresarse en el formato sencillo:

$$\Phi^L = e^{i\theta} \quad , \quad \Phi^R = e^{-i\theta} \quad (86)$$

donde:

$$\cos \theta = F |j m_j l_- \rangle \quad , \quad \sin \theta = f |j m_j l_+ \rangle \quad (87)$$

4. Aproximación no relativista y estructura fina.

En la aproximación no relativista [12] utilizada para deducir los factores de Landé y Thomas la energía total relativista se expresa como:

$$E \longrightarrow m c^2 \quad (88)$$

donde:

$$E = \gamma m c^2 \quad , \quad \gamma = \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-1/2} \quad (89)$$

Como se describe en el documento UFT 172 y 173 (www.aias.us) esta aproximación conduce al hamiltoniano:

$$\hat{H} = m c^2 + e\varphi + \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2m} \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \frac{e}{4m^2 c^2} \hat{\sigma} \cdot (\hat{p} - e \mathbf{A}) \varphi \hat{\sigma} \cdot (\hat{p} - e \mathbf{A}) + \dots \quad (90)$$

donde el potencial vectorial \mathbf{A} y la densidad de flujo magnético \mathbf{B} han sido introducidos a través de la prescripción mínima [1 – 14]:

$$\hat{p} \longrightarrow \hat{p} - e \mathbf{A} \quad (91)$$

También:

$$\hat{H} \Phi^R = E \Phi^R \quad , \quad (92)$$

$$\hat{H} \Phi^L = E \Phi^L \quad , \quad (93)$$

y así:

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad , \quad (94)$$

donde el espinotensor del fermión se define como:

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_1^R & \psi_2^R \\ \psi_1^L & \psi_2^L \end{bmatrix} . \quad (95)$$

La denominación “espinotensor del fermión” se utiliza para distinguirlo del espinotensor de Dirac.

Re-expresamos la Ec. (94) como:

$$\hat{H}_1 \psi = (E - m c^2 + e\varphi) \psi \quad (96)$$

donde:

$$\begin{aligned} \hat{H}_1 &= \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e\hbar}{2m} \hat{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \frac{e}{4m^2 c^2} \hat{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e \mathbf{A}) \varphi \hat{\sigma} \cdot (\hat{\mathbf{p}} - e \mathbf{A}) + \dots \\ &:= \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \hat{H}_4 . \end{aligned} \quad (97)$$

En ausencia de espín esta ecuación deviene:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \psi = (E - m c^2 + e\varphi) \psi \quad (98)$$

y en el límite no relativista:

$$E = m c^2 \longrightarrow T = \frac{1}{2} m v^2 . \quad (99)$$

De manera que la Ec. (98) deviene la ecuación de Schroedinger para el átomo de H:

$$\frac{\hat{p}^2}{2m} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E_{nr} \psi \quad (100)$$

donde la energía total no relativista es la suma de las energías cinética y potencial:

$$E_{nr} = T + V = T - e\varphi . \quad (101)$$

Es bien sabido [13, 14] que la ecuación de Schroedinger describe las principales características del espectro del H pero no describe la estructura fina.

Para obtener la estructura fina consideremos la Ec. (25):

$$\sigma \cdot \hat{\mathbf{p}} \sigma \cdot \hat{\mathbf{p}} = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{\hat{L}^2}{r^2} + \frac{\hbar}{r^2} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (102)$$

en donde:

$$\hat{L}^2 \Phi^R = \hbar^2 l_-(l_- + 1) \Phi^R \quad (103)$$

$$\hat{L}^2 \Phi^L = \hbar^2 l_+(l_+ + 1) \Phi^L \quad (104)$$

donde:

$$l_{\pm} = j \pm \frac{1}{2} \quad (105)$$

Los primeros dos términos en el lado derecho de la Ec. (102) están presentes en la ecuación de Schroedinger para el H [14] pero el tercer término está ausente de la ecuación de Schroedinger. A partir de la ecuación del operador (14):

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{S}} |j m_j l\rangle &= \frac{1}{2} (j^2 - \hat{L}^2 - \hat{S}^2) |j m_j l\rangle \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) |j m_j l\rangle \end{aligned} \quad (106)$$

El componente del hamiltoniano \hat{H}_3 da el valor de $g = 2$ o factor de Landé del electrón en el átomo de H (véase documento UFT 172 y UFT 173). El componente del hamiltoniano \hat{H}_4 da el factor de Thomas de 2 en el denominador del término de la órbita del espín como sigue:

$$\hat{H}_4 = \frac{e^2}{8\pi m^2 c^2 r^3 \epsilon_0} \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{L}} \quad (107)$$

La evaluación de la integral radial en esta aproximación da [14]:

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{a_0^3}{n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1)} \quad (108)$$

donde el radio de Bohr es:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^4} \quad (109)$$

Aquí n es el número cuántico principal de H, y ϵ_0 es la permitividad del vacío. Denotemos:

$$\xi_{nl} = e^2 (8\pi m^2 c^2 a_0^3 \epsilon_0 n^3 l(l + \frac{1}{2})(l + 1) \hbar c)^{-1} \quad (110)$$

entonces los niveles de energía del átomo de H vienen dados en esta aproximación por:

$$\begin{aligned}
E &= \frac{1}{2} \hbar^2 (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \langle |j m_j l| \xi | j m_j l \rangle \\
&= \frac{1}{2} \hbar c \xi_{nl} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1))
\end{aligned} \tag{111}$$

donde:

$$\xi = \frac{e^2}{8\pi m^2 c^2 r^3 \epsilon_0} \quad . \tag{112}$$

5. Deducción del principio de exclusión de Pauli.

Por observación de los espectros atómicos moleculares, Pauli descubrió en 1925 que los electrones nunca pueden tener el mismo conjunto de números cuánticos. Definió esta observación como el principio de que la función de onda completa es anti simétrica bajo el intercambio de los electrones cualesquiera, generalmente, fermiones. Esto ha sido aceptado [12–14] como un axioma fundamental de la mecánica cuántica. En el átomo de H se ha demostrado en la Sección 2 que las funciones de onda del único electrón del átomo de H debe estar conformado por las combinaciones (63) a (66), en las que el efecto de paridad es el siguiente:

$$\hat{P} (\Phi^R) = \Phi^L \quad , \quad \hat{P} (\Phi^L) = \Phi^R \quad . \tag{113}$$

Por lo tanto, la paridad posee el siguiente efecto sobre F y f:

$$\hat{P} (F) = F \quad , \quad \hat{P} (f) = -f \quad . \tag{114}$$

Estas combinaciones de estados de espín hacia arriba y hacia abajo del electrón indican que son el origen fundamental del principio de exclusión de Pauli, el cual en consecuencia resulta a partir de la ecuación del fermión.

Consideremos la estructura matemática de la Ec.(100) de Schroedinger, una estructura del tipo:

$$\hat{H} \psi = E \psi \quad . \tag{115}$$

Esta estructura significa [14] que en el átomo de helio, con dos electrones, la función de onda total debe de ser el producto:

$$\Psi (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{n_1 l_1 m_1} (\mathbf{r}_1) \psi_{n_2 l_2 m_2} (\mathbf{r}_2) \tag{116}$$

de las funciones de onda individuales de cada electrón. Si se considera ahora el espín del electrón, debe de haber productos tales como:

$$\Psi_1^R (A) \Psi_1^R (B) , \dots , \Psi_2^L (A) \Psi_2^L (B) , \tag{117}$$

donde A y B indican el electrón A y el electrón B, respectivamente. Denotando:

$$F_1^-(A) = F_1 | j m_j l_- \rangle , \quad (118)$$

$$f_1^+(A) = f_1 | j m_j l_+ \rangle , \quad (119)$$

y así sucesivamente. Un producto típico de las funciones de onda es:

$$\Psi_1^R(A) \Psi_1^R(B) = (F_1^-(A) + i f_1^+(A)) (F_1^-(B) + i f_1^+(B)) \quad (120)$$

donde la aparición de i es simplemente una consecuencia de las definiciones (70) utilizadas por conveniencia. Aplicando ahora paridad:

$$\hat{P} (\Psi_1^R(A) \Psi_1^R(B)) = (F_1^-(A) - i f_1^+(A)) (F_1^-(B) - i f_1^+(B)) . \quad (121)$$

Finalmente utilizando el resultado algebraico:

$$(F_1^-(A) + i f_1^+(A)) (F_1^-(B) + i f_1^+(B)) = (F_1^-(B) + i f_1^+(B)) (F_1^-(A) + i f_1^+(A)) \quad (122)$$

y aplicando paridad al lado derecho:

$$\hat{P} ((F_1^-(A) + i f_1^+(A)) (F_1^-(B) + i f_1^+(B))) = (F_1^-(A) - i f_1^+(A)) (F_1^-(B) - i f_1^+(B)) . \quad (123)$$

El principio de exclusión de Pauli es el resultado de la operación de paridad:

$$\hat{P} ((F_1^-(A) f_1^+(B) + f_1^+(A) F_1^-(B))) = - (F_1^-(B) f_1^+(A) + f_1^+(B) F_1^-(A)) \quad (124)$$

Puede observarse que la función de onda completa es antisimétrica bajo el intercambio de A y B, lo cual significa que si A es reemplazado por B, y B es reemplazado por A, la función de onda cambia de signo. Por observación de los espectros atómicos y moleculares ésta es la función de onda observada, una en la cual no hay dos electrones que posean el mismo conjunto de valores de números cuánticos.

Agradecimientos.

Se agradece al Gobierno Británico por el otorgamiento del premio de la Pensión Vitalicia y otros altos honores, y al grupo técnico de AIAS y a otros por muchas discusiones interesantes. Se agradece a Alex Hill y colegas por el preciso tipografiado y las traducciones, a David Burleigh por publicación y ordenamiento del material en el portal www.aias.us y a Simon Clifford por su ayuda en las grabaciones.

Referencias.

- [1] M. W. Evans et al., “Generally Covariant Unified Field Theory” (Abramis 2005 y sigs), siete volúmenes a la fecha.
- [2] M. W. Evans, S. Crothers, H. Eckardt y K. Pendergast, “Criticisms of the Einstein Field Equation” (Cambridge International Science Publishing, 2011).
- [3] Kerry Pendergast, “The Life of Myron Evans” (Cambridge International Science Publishing, 2011).
- [4] L. Felker, “The Evans Equations of Unified Field Theory” (Abramis 2007). Hay traducción castellana en la Sección Español del portal www.aias.us .
- [5] Los portales de la teoría ECE: www.aias.us, archivado como portal sobresaliente en los archives de portales de la Biblioteca Nacional de Gales y en la Biblioteca Británica (www.webarchive.org.uk), www.atomicprecision.com, www.et3m.net, www.upitec.org.
- [6] M. W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, “ECE Theory Applied to H Bonding” (Academia de Ciencias de Serbia, 2010).
- [7] M. W. Evans, ed., “Modern Nonlinear Optics”, segunda edición (Wiley, 2001), en tres volúmenes, ibid, M. W. Evans y S. Kielich, eds., primera edición, (Wiley 1992, 1993, 1997), en tres volúmenes.
- [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 J. - P. Vigiér, “The Enigmatic Photon” (Kluwer, 1994 a 2002), en cinco volúmenes.
- [10] M. W. Evans y A. A. Hasanein, “The Photomagneton in Quantum Field Theory” (World Scientific, 1994).
- [11] M. W. Evans y H. Eckardt, “The Fermión Equation” (Cambridge International Science Publishing, en prep.)
- [12] L. H. Ryder, “Quantum Field Theory” (Cambridge Univ. Press, 1996, 2a Ed.).
- [13] E. Merzbacher, “Quantum Mechanics” (Wiley, 1970, 2a Ed.).
- [14] P. W. Atkins, “Molecular Quantum Mechanics” (Oxford Univ. Press, 1983, 2a Ed.).