Desarrollo de Nuevas Espectroscopías a partir de la Ecuación del Fermión de la Teoría ECE.

por

M. W. Evans y H. Eckardt

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

Traducción: Alex Hill (www.et3m.net)

Resumen.

Se utiliza la estructura del hamiltoniano de la ecuación del fermión de la teoría ECE con un álgebra de Pauli bien conocida pero hasta ahora no utilizada, para desarrollar novedosos resultados, los cuales incluyen la magnetizabilidad de los orbitales hidrogénicos, y novedosos términos de órbita de espín. Todos estos resultados debieran de producir nuevas espectroscopias observables. Si estas espectroscopias no son observables a nivel experimental, la mecánica cuántica se volvería inconsistente a un nivel fundamental. Se ilustra, mediante un ejemplo, la forma en la cual estos resultados se traducen en una teoría de colisión de partículas.

Palabras clave: Teoría ECE, ecuación del fermión de la teoría ECE, empleo novedoso del álgebra de Pauli, magnetizabilidad de orbitales hidrogénicos, novedosas espectroscopias por acoplamiento de órbitas de espín.

1. Introducción.

En documentos recientes de esta serie [1 – 10] se ha incorporado una conocida [11] álgebra de Pauli en la ecuación del fermión de la teoría ECE, para producir varias novedosas espectroscopías, cada uno de los cuales debiera de ser observable experimentalmente. La misma clase de teoría puede utilizarse en colisiones y dispersión entre partículas, así como en reactores nucleares de baja energía. En la sección dos de este documento se utiliza este empleo novedoso del álgebra de Pauli con la ecuación del fermión para producir varias clases de resultados a partir de cada hamiltoniano relevante. Los valores esperados de energía para los orbitales hidrogénicos se incluyen en la sección tres mediante el empleo de álgebra computacional. El primer tipo de hamiltoniano desarrollado mediante este método produce la magnetizabilidad década orbital hidrogénico considerado, produciendo una variedad de resultados novedosos. Se ejemplifica la forma en la cual la teoría se traduce en una teoría de colisión entre partículas. Se identifican tres clases de nuevos hamiltoniano de órbita de espín, mediante la aplicación de este método al típico hamiltoniano de órbita de espín, con una novedosa aplicación de álgebra de Pauli. En la Sección 3, se evalúan los valores esperados de energía a partir de cada clase, para los orbitales hidrogénicos. Estos valores esperados de energía debieran de ser observables a nivel experimental, ya que de lo contrario la mecánica cuántica se volvería internamente inconsistente. En futuros documentos, esta metodología se desarrollará en varias formas diferentes.

2. Evaluación de los Hamiltonianos.

El hamiltoniano completo que se está considerando de una manera sistemática, término a término, es:

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

en una teoría semi clásica donde el campo electromagnético interactúa con el átomo de hidrógeno. La carga sobre un electrón en un dado orbital es *-e*, su masa es igual a *m*, y para cada índice de polarización de la teoría ECE los potenciales escalares y vectoriales del campo electromagnético son, respectivamente, ϕ y $\underline{A}$. Se utiliza la base SU(2) con las matrices de Pauli $\underline{\sigma}$ como elementos básicos. El momento orbital lineal de un electrón es *p* y la función de onda se denota como ψ.

Se utiliza una aproximación no relativista en la deducción de hamiltoniano:

$$E \sim mc^2 \quad (2)$$

y se supone que

$$e\phi \ll mc^2. \quad (3)$$

Algunos términos del hamiltoniano (1) se han desarrollado en documentos inmediatamente precedentes, utilizando la conocida [11] álgebra de Pauli:

$$\underline{\sigma}\cdot\underline{p} = \frac{\underline{\sigma}\cdot\underline{r}}{r^2}\left(\underline{r}\cdot\underline{p} + i\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\right) \tag{4}$$

donde $\underline{r}$ es el vector de posición del electrón de un orbital de un átomo de hidrógeno, y $\underline{L}$ es su momento angular:

$$\underline{L} = \underline{r}\times\underline{p}. \tag{5}$$

El operador del momento angular de espín se define como de costumbre:

$$\underline{S} = \frac{1}{2}\hbar\underline{\sigma}. \tag{6}$$

Primero consideramos el término:

$$H_1\psi = \frac{1}{2m}\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\,\psi \tag{7}$$

que es la energía cinética del electrón en la base SU(2). A partir de las Ecs. (4) y (7):

$$\begin{aligned}\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{p} &= \frac{1}{r^2}\left(\underline{r}\cdot\underline{p}+i\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\right)\left(\underline{r}\cdot\underline{p}+i\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\right)\\ &= \frac{1}{r^2}\left(\underline{r}\cdot\underline{p}\,\underline{r}\cdot\underline{p}+i\left(\underline{r}\cdot\underline{p}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{L}+\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\right)-L^2-i\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\times\underline{L}\right).\end{aligned} \tag{8}$$

Esta ecuación clásica se cuantiza mediante el empleo de [1 – 11]:

$$\underline{r}\cdot\underline{p}\,\psi = \frac{\hbar}{i}\,r\frac{\partial\psi}{\partial r} \tag{9}$$

$$L^2\psi = \hbar^2 l(l+1)\psi \tag{10}$$

$$\underline{L}\times\underline{L}\,\psi = i\hbar\psi \tag{11}$$

$$\underline{S}\cdot\underline{L}\,\psi = \frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)\psi \tag{12}$$

Por lo tanto:

$$\underline{r}\cdot\underline{p}\left(\underline{r}\cdot\underline{p}\psi\right)=\frac{\hbar}{i}r\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(\left(\frac{\hbar}{i}r\frac{\partial}{\partial r}\right)\psi\right)\right) \tag{13}$$

utilizando el Teorema de Leibnitz:

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

$$=-\hbar^2\left(2r\frac{\partial\psi}{\partial r}+r^2\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}\right)$$

$$=-\hbar^2\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right). \tag{14}$$

Ahora utilizamos:

$$\frac{\partial}{\partial r}\left(\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\psi\right)=\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\frac{\partial\psi}{\partial r}, \tag{15}$$

$$\underline{p}=-i\hbar\underline{\nabla} \tag{16}$$

para encontrar que la Ec. (7) es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi=\frac{1}{2m}\left(-\frac{\hbar^2}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)-\frac{l(l+1)}{r^2}\hbar\psi\right.$$
$$\left.+\frac{\hbar}{r}\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\psi\right)+\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\hbar\frac{\underline{\sigma}\cdot\underline{L}}{r^2}\psi\right) \tag{17}$$

en donde:

$$\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\psi=\frac{2}{\hbar}\underline{S}\cdot\underline{L}\psi=\hbar\left(j(j+1)-l(l+1)-S(S+1)\right)\psi \tag{18}$$

Por lo tanto, el hamiltoniano H_1 puede expresarse como

$$H_1\psi=-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+l(l+1)\psi\right)+\frac{1}{2m}\left(\frac{2}{r}\underline{S}\cdot\underline{L}\left(2\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{\psi}{r}\right)\right) \tag{19}$$

El laplaciano en coordenadas polares esféricas es:

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2 \operatorname{sen}\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\operatorname{sen}\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\operatorname{sen}\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\phi^2} \qquad (20)$$

y los armónicos esféricos se definen [11] como:

$$L^2 Y_l^m = l(l+1)\hbar^2 Y_l^m \qquad (21)$$

Por lo tanto, si:

$$\psi = Y_l^m \qquad (22)$$

la primera combinación de términos en la Ec. (19) es el término laplaciano. El resultado global es, por lo tanto:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\sigma}\cdot\underline{\nabla}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{\nabla}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \frac{1}{m}\left(\frac{\underline{S}\cdot\underline{L}}{r}\left(2\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{\psi}{r}\right)\right) \qquad (23)$$

donde

$$\psi = Y_l^m. \qquad (24)$$

Los armónicos esféricos forman parte de las funciones de onda hidrogénicas, y la Ec. (23) se expresa en coordenadas polares esféricas. Puede expresarse como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\underline{\sigma}\cdot\underline{\nabla}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{\nabla}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \frac{\hbar^2}{2mr}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)\left(2\frac{\partial\psi}{\partial r}+\frac{\psi}{r}\right) \qquad (24.b)$$

dando lugar a dos clases novedosas de valores esperados de energía:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{m}\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)\int \psi^* \frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\, d\tau \tag{25}$$

y:

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m}\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)\int \psi^* \frac{1}{r^2}\psi\, d\tau \tag{26}$$

Un desarrollo más riguroso para el átomo de hidrógeno utilizaría el hamiltoniano:

$$H_2\psi = \left(e\phi + \frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\right)\psi \tag{27}$$

en una aproximación no relativista. Es hamiltoniano habitual de Schroedinger en el átomo de hidrógeno es:

$$H_2 = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{28}$$

donde la interacción entre el electrón y el protón viene dada por el potencial de Coulomb en el cual ε_0 es la permitividad en el vacío, expresada en unidades S.I. La Ec. (28) produce las conocidas funciones de onda hidrogénicas en lugar de los armónicos esféricos. La Ec. (23) , por lo tanto, se extiende a :

$$H_4\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\psi + \frac{1}{m}\left(\frac{\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}}{r}\left(2\frac{\partial\psi}{\partial r} + \frac{\psi}{r}\right)\right) \tag{29}$$

que debe de resolverse en forma numérica.

El siguiente término a desarrollarse utilizando la Ec. (4) es el término cuadrático en el potencial:

$$H_5\psi = \frac{e^2}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A}\,\psi \tag{30}$$

Nótese ahora que:

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A} = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}}{r^2}\left(\mathbf{r}\cdot\mathbf{A} + i\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}\times\mathbf{A}\right) \tag{31}$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{A})^* = \frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}}{r^2}\left(\mathbf{r}\cdot\mathbf{A} - i\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{r}\times\mathbf{A}\right) \tag{32}$$

Para un campo magnético uniforme:

$$\underline{A} = \frac{1}{2}\underline{B} \times \underline{r} \tag{33}$$

y

$$\underline{r}.\underline{A} = 0. \tag{34}$$

De manera que:

$$(\underline{\sigma}.\underline{A})(\underline{\sigma}.\underline{A})^{*} = \frac{1}{r^2}\underline{\sigma}.\underline{r}\times\underline{A}\,\underline{\sigma}.\underline{r}\times\underline{A}$$

$$= \frac{1}{r^2}\left(\underline{r}.\underline{r}\,\underline{A}.\underline{A} - \underline{r}.\underline{A}\,\underline{A}.\underline{r}\right) = A^2 \tag{35}$$

Por lo tanto, el hamiltoniano (30) puede desarrollarse para valores reales de A cómo:

$$H_5\psi = \frac{e^2}{2m}\underline{\sigma}.\underline{A}\,\underline{\sigma}.\underline{A}\,\psi = \frac{e^2}{2m}\underline{\sigma}.\underline{A}(\underline{\sigma}.\underline{A})^{*}\psi$$

$$= \frac{e^2A^2}{2m}\psi. \tag{36}$$

A partir de las Ecs. (33) y (35):

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

$$= \frac{1}{4r^2}\left(r^2\underline{B}\times\underline{r}.\underline{B}\times\underline{r} - \underline{r}.\underline{A}\,\underline{A}.\underline{r}\right)$$

$$= \frac{1}{4}\left(B^2r^2 - (\underline{r}.\underline{B})(\underline{r}.\underline{B})\right) \tag{37}$$

Por lo tanto

$$H_5\psi = \frac{e^2}{8m}\left(B^2r^2 - (\underline{r}.\underline{B})(\underline{r}.\underline{B})\right)\psi \tag{38}$$

que es cuadrática en la densidad de flujo magnético $\underline{B}$. Para simplicidad de argumento supongamos que:

$$\underline{B} = B_Z \underline{k} \tag{39}$$

entonces:

$$H_5 \psi = \frac{e^2 B_Z^2}{8m}\left(r^2 - Z^2\right)\psi = \frac{e^2 B_Z^2}{8m} r^2\left(1 - \cos^2\theta\right)\psi \tag{40}$$

en coordenadas polares esféricas. Los valores esperados de energía son:

$$E_5 = \frac{e^2 B_Z^2}{8m}\int \psi^* r^2\left(1 - \cos^2\theta\right)\psi \, d\tau \tag{41}$$

donde el elemento de volumen en coordenadas polares esféricas es:

$$d\tau = r^2 \operatorname{sen}\theta \, dr \, d\theta \, d\phi \tag{42}$$

Por lo tanto:

$$E_5 = \frac{e^2 B_Z^2}{8m}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{r=0}^{\infty} \psi^* r^4\left(1 - \cos^2\theta\right)\operatorname{sen}\theta \, \psi \, dr \, d\theta \, d\phi \tag{43}$$

y la magnetizabilidad del orbital hidrogénico es:

$$\chi = \frac{e^2}{8m}\int_{\phi=0}^{2\pi}\int_{\theta=0}^{\pi}\int_{r=0}^{\infty} \psi^* r^4\left(1 - \cos^2\theta\right)\operatorname{sen}\theta \, \psi \, dr \, d\theta \, d\phi \tag{44}$$

La energía:

$$E = \chi B^2 \tag{45}$$

puede utilizarse en teoría de perturbación de segundo orden de una manera novedosa.

Este tipo de teoría puede traducirse a teoría de colisión entre partículas de la siguiente manera. Consideremos conservación de energía y momento en el proceso de colisión:

$$E + E_1 = E' + E'' \tag{46}$$

$$\underline{p} + \underline{p}_1 = \underline{p}' + \underline{p}'' \tag{47}$$

de manera que la traducción se produce de la siguiente manera:

$$\underline{p}_1 \equiv e\underline{A} \;\; ; \;\; E_1 \equiv e\phi . \tag{48}$$

Consideremos ahora al hamiltoniano de energía cinética:

$$H_0 \psi = \frac{1}{2m} \underline{\sigma} \cdot \underline{p}_1 \, \underline{\sigma} \cdot \underline{p}_1 \psi \tag{49}$$

y permitamos que:

$$\underline{p}_1 = \frac{1}{2} \underline{B} \times \underline{r} \tag{50}$$

en analogía con:

$$\underline{A} = \frac{1}{2} \underline{B} \times \underline{r} \tag{51}$$

Por lo tanto, β es el campo gravitomagnético del modelo de ingeniería de la teoría ECE [1 – 10]. El momento angular asociado con $\underline{p}_1$ es:

$$\underline{L}_1 = \underline{r} \times \underline{p}_1 = \frac{1}{2} \left(r^2 \underline{\beta} - \underline{r} \left(\underline{r} \cdot \underline{\beta} \right) \right) . \tag{52}$$

Nótese que:

$$\underline{r} \cdot \underline{p}_1 = \frac{1}{2} \underline{r} \cdot \underline{\beta} \times \underline{r} = \frac{1}{2} \underline{\beta} \cdot \underline{r} \times \underline{r} = 0 \tag{53}$$

El momento angular según el eje Z en coordenadas polares esféricas es:

$$L_{1Z} = \frac{1}{2} r^2 \beta_Z \left(1 - \cos^2\theta \right) \tag{54}$$

de manera que:

$$p_Z = m_1 \frac{d\theta}{dt} = m_1 \omega \tag{55}$$

donde m_1 es la masa de la partícula con momento p_1 . Aquí:

$$\omega = \frac{d\theta}{dt} \tag{56}$$

es la velocidad angular de la partícula 1, la partícula con momento $\underline{p}_1$.

A partir de la Ec. (49):

$$H_6 \psi = \frac{1}{8m}\left(p^2 r^2 - (\underline{r} \cdot \underline{p})(\underline{r} \cdot \underline{p})\right)\psi \tag{57}$$

y si:

$$\underline{p} = p_Z \underline{k} \tag{58}$$

el hamiltoniano es:

$$H_6 \psi = \frac{m_1^2 \omega^2 r^2}{m}\left(1 - \cos^2\theta\right)\psi \tag{59}$$

cuyos valores esperados de energía son:

$$E_6 = \frac{m_1^2 \omega^2}{8m} \int \psi^* \left(1 - \cos^2\theta\right) r^2 \psi \, d\tau \tag{60}$$

Si ψ son las funciones de onda hidrogénicas, entonces E_6 son los niveles de energía de un átomo de hidrógeno que interactúa con una partícula con momento $\underline{p}_1$ y el momento angular $\underline{L}_1$ dado por la Ec. (52).

El término orbital de espín convencional de hamiltoniano (1) es [1 – 11]:

$$H_7 \psi = \frac{c^2 \underline{\sigma} \cdot \underline{P}\, \underline{\sigma} \cdot \underline{P}}{E - e\phi + mc^2} \psi \tag{61}$$

donde el potencial de Coulomb:

$$\phi = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{62}$$

se utiliza para describir la atracción entre el electrón y el protón en el átomo de hidrógeno. En la aproximación no relativista:

$$E \sim mc^2 \tag{63}$$

La Ec. (61) deviene:

$$H_7\psi = \frac{1}{2m}\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\left(1+\frac{e\phi}{2mc^2}\right)\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\,\psi \tag{64}$$

y el hamiltoniano de órbita de espín deviene:

$$H_8\psi = \frac{e}{4m^2c^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\,\phi\,\underline{\sigma}\cdot\underline{p}\,\psi \tag{65}$$

Ahora, utilizamos la Ec. (4) en la Ec. (65) para hallar el novedoso hamiltoniano:

$$H_8\psi = \frac{e}{4m^2c^2}\left(\underline{r}\cdot\underline{p}+i\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\right)\frac{\phi}{r^2}\left(\underline{r}\cdot\underline{p}+i\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\right)\psi \tag{66}$$

el cual da lugar a varias nuevas espectroscopías.

La primera clase de nueva espectroscopías se basa en:

$$H_9\psi = \frac{e}{4m^2c^2}\underline{r}\cdot\underline{p}\left(\frac{\phi}{r^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\,\psi\right) \tag{67}$$

donde

$$\underline{r}\cdot\underline{p}\,\psi = -i\hbar r\frac{\partial\psi}{\partial r} \tag{68}$$

en la representación del operador [11]. De manera que:

$$H_9\psi = -\frac{ie\hbar r}{4m^2c^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\phi}{r^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\,\psi\right) \tag{69}$$

Ahora utilizamos:

$$\underline{\sigma} \cdot \underline{r}\, \underline{\sigma} \cdot \underline{p} = \underline{r} \cdot \underline{p} + i \underline{\sigma} \cdot \underline{L} \tag{70}$$

de manera que:

$$\underline{r} \cdot \underline{p} = \underline{\sigma} \cdot \underline{r}\, \underline{\sigma} \cdot \underline{p} - i \underline{\sigma} \cdot \underline{L} \tag{71}$$

Por lo tanto, la parte real de H_9 en la Ec. (69) es:

$$\text{Real } H_q \psi = -\frac{e \hbar r}{4 m^2 c^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\phi}{r^2} \underline{\sigma} \cdot \underline{L} \psi \right) \tag{72}$$

$$= \frac{-e \hbar^2 r}{4 m^2 c^2} \left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right) \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{\phi}{r^2} \psi \right)$$

Utilizando la Ec. (62) se obtiene:

$$H_q \psi = \frac{e^2 \hbar^2}{16 m^2 c^2 \pi \epsilon_0} \left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right) \frac{1}{r^3} \left(3\psi - r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \tag{73}$$

que produce valores esperados de energía:

$$E_{q1} = \frac{3 e^2 \hbar^2}{16 \pi \epsilon_0 m^2 c^2} \left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right) \int \frac{\psi^* \psi}{r^3} d\tau \tag{74}$$

y

$$E_{q2} = \frac{-e^2 \hbar^2}{16 \pi \epsilon_0 m^2 c^2} \left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1) \right) \int \frac{\psi^* \psi}{r^2} d\tau \tag{75}$$

Según la interpretación de Born de la mecánica cuántica, estos valores esperados de energía son observables. Si resultan ser no observables, la mecánica cuántica habría desarrollado una profunda inconsistencia interna.

La función de onda hidrogénicas es [11]:

$$\psi = R_{nl}(r)\, Y_{l m_l}(\theta, \phi) \tag{76}$$

de manera que una integral tal como (74) es:

$$E_{91} = \frac{3e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2}\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)\int_0^\infty \frac{R_{nl}^2\,dr}{r}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi} YY^* \operatorname{sen}\theta\, d\theta\, d\phi \tag{77}$$

en donde:

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \int_0^\infty \frac{R_{nl}^2}{r}\,dr = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^3 \left(n^3 l\left(l+\frac{1}{2}\right)(l+1)\right)^{-1} \tag{78}$$

donde:

$$a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} \tag{79}$$

es el radio de Bohr [1 – 11]. Aquí, n es el número cuántico principal, l es el número cuántico del momento angular. Estos resultados analíticos se confirma numéricamente en la sección tres. Se observa que la energía E_{91} diverge hacia el infinito para orbitales S, pero de otro modo es finita.

El hamiltoniano principal de orbital de espín (66) puede dividirse en los siguientes cuatro hamiltoniano, cada uno de los cuales produce en general una novedosa espectroscopia:

$$H_{10}\psi = \frac{e}{4m^2c^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\left(\frac{\phi}{r^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\,\psi\right) \tag{80}$$

$$H_{11}\psi = \frac{ie}{4m^2c^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\left(\frac{\phi}{r^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\,\psi\right) \tag{81}$$

$$H_{12}\psi = \frac{ie}{4m^2c^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\left(\frac{\phi}{r^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\psi\right) \tag{82}$$

$$H_{13}\psi = -\frac{e}{4m^2c^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\left(\frac{\phi}{r^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\psi\right) \tag{83}$$

En lo que resta de esta sección, estos hamiltonianos se evalúan sistemáticamente, y su valores esperados de energía hidrogénicas se calculan en la Sección 3. La primera clase a considerarse es:

$$H_{11}\psi = \frac{ie}{4m^2c^2}\,\frac{\phi}{r^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\psi \tag{84}$$

donde:

$$\underline{S} = \frac{1}{2}\hbar\,\underline{\sigma} \tag{85}$$

Por lo tanto:

$$H_{11}\psi = \frac{ie\hbar}{4m^2c^2}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)\frac{\phi}{r^2}\underline{r}\cdot\underline{p}\psi \tag{86}$$

donde:

$$\underline{S}\cdot\underline{L}\psi = \frac{\hbar^2}{2}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)\psi \tag{87}$$

$$\phi = -\frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} \tag{88}$$

y:

$$\underline{r}\cdot\underline{p}\psi = -i\hbar r\frac{\partial\psi}{\partial r} \tag{89}$$

Por lo tanto, esta clase de hamiltoniano es:

$$H_{11}\psi = \frac{-e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)\frac{1}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial r} \tag{90}$$

Utilizando el potencial de Coulomb (88) da:

$$H_{12}\psi = \frac{e\hbar}{4m^2c^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\frac{\phi}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r} \tag{91}$$

cuyos valores esperados de energía hidrogénicas son:

$$E_{11} = \frac{-e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2}\left(j(j+1)-l(l+1)-s(s+1)\right)\int\frac{\psi^*}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial r}d\tau \tag{92}$$

donde:

$$\psi = R_{nl}(r)Y_{lm_l}(\theta,\phi) \tag{93}$$

y:

$$d\tau = r^2\,\mathrm{sen}\,\theta\,dr\,d\theta\,d\phi \tag{94}$$

La segunda clase de hamiltoniano a considerarse es:

$$H_{13}\psi = -\frac{e}{4m^2c^2}\frac{\phi}{r^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\psi \tag{95}$$

$$= -\frac{e}{4m^2c^2}\frac{\phi}{r^2}\left(L^2 + i\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\times\underline{L}\right)\psi$$

Utilizando la representación del operador (11) da el hamiltoniano:

$$H_{13}\psi = \frac{e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2r^3}\left(2l(l+1) - j(j+1) + s(s+1)\right)\psi \tag{96}$$

cuyos valores esperados de energía observables son:

$$E_{13} = \frac{e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2}\left(2l(l+1) - j(j+1) + s(s+1)\right)\int\frac{\psi^*\psi}{r^3}\,d\tau \tag{97}$$

Estos valores se calculan mediante álgebra computacional en la Sección 3.

La tercera clase de hamiltoniano se obtiene de:

$$H_{12}\psi = \frac{ie}{4m^2c^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\left(\frac{\phi}{r^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\psi\right) \tag{98}$$

utilizando nuevamente la representación del operador (9). De manera que:

$$H_{12}\psi = \frac{3e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2r^3}\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)\psi \tag{99}$$

La cuarta clase se obtiene de:

$$H_{10}\psi = \frac{e}{4m^2c^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\left(\frac{\phi}{r^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\,\psi\right) \tag{100}$$

en donde la representación del operador (9) se utiliza dos veces, de manera que:

$$H_{10} = -\frac{ie\hbar}{4m^2c^2} r \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\phi}{r^2}\left(-i\hbar r \frac{\partial \psi}{\partial r}\right)\right)$$

$$= \frac{-e\hbar^2}{4m^2c^2} r \frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\phi}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right) \qquad (101)$$

Nótese ahora que $\partial\psi/\partial r$ es una función de *r*, de manera que el Teorema de Leibnitz aplica de la siguiente manera:

$$H_{10}\psi = \frac{-e\hbar^2}{4m^2c^2} r\left(\left(\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{\phi}{r}\right)\right)\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\phi}{r}\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}\right) \qquad (102)$$

Por lo tanto, esta clase de hamiltoniano es:

$$H_{10}\psi = \frac{-e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2}\left(\frac{2}{r^2}\frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{1}{r}\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}\right) \qquad (103)$$

cuyos valores esperados de energía observables son:

$$E_{10} = -\frac{e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2}\int \psi^*\left(\frac{2}{r^2}\frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{1}{r}\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}\right) d\tau \qquad (104)$$

Estos se calculan mediante álgebra computacional para los orbitales hidrogénicos en la Sección 3.

La quinta clase se obtiene a partir de:

$$H_{14}\psi = \frac{ie}{4m^2c^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\left(\frac{\phi}{r^2}\underline{r}\cdot\underline{p}\,\psi\right) \qquad (105)$$

en donde se utiliza la representación funcional:

$$\underline{r}\cdot\underline{p} = \underline{\sigma}\cdot\underline{r}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{p} - i\underline{\sigma}\cdot\underline{L} \qquad (106)$$

en lugar de la representación del operador (9). Este método da:

$$\mathrm{Real}\, H_{14}\psi = \frac{e}{4m^2c^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\left(\frac{\phi}{r^2}\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\psi\right) \qquad (107)$$

que es igual a la Ec. (95) excepto por un cambio de signo. La sexta y última clase considerada aquí se obtiene a partir de:

$$H_{15}\psi = \frac{ie}{4m^2c^2}\,\underline{r}\cdot\underline{p}\left(\frac{\phi}{r^2}\,\underline{\sigma}\cdot\underline{L}\,\psi\right) \tag{108}$$

en donde se utiliza la representación funcional (106). Este método da el mismo resultado que la Ec. (84).

Las tres clases diferentes de hamiltoniano de órbita de espín que surgen son las siguientes. La Clase I es:

$$H_{I}\psi = \frac{-e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2}\left(\frac{2}{r^2}\frac{\partial\psi}{\partial r} - \frac{1}{r}\frac{\partial^2\psi}{\partial r^2}\right) \tag{109}$$

la Clase II es:

$$H_{II}\psi = \frac{e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2}\left(j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\right)\left(3\psi - r\frac{\partial\psi}{\partial r}\right) \tag{110}$$

y la Clase III es:

$$H_{III}\psi = \frac{e^2\hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2c^2}\left(2l(l+1) - j(j+1) + s(s+1)\right)\psi \tag{111}$$

Los eigenvalores de la energía hidrogénica observable de estas clases se evalúan mediante álgebra computacional en la Sección 3, donde se analizan y tabulan.

3. Evaluación de Valores Esperados de Energía.

Sección a cargo del coautor Horst Eckardt

Agradecimientos.

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

Referencias.

[1] M .W. Evans, "Definitive Refutations of the Einsteinian General Relativity", publicación especial número seis de la ref. (2) (Cambridge International Science Publishing, CISP, www.cisp-publishing.com, 2012).

[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).

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

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

[6] M .W. Evans, H. Eckardt y D. W. Lindstrom, documentos y plenaries en la Academia de Ciencias de Serbia, Physica B, y Found. Phys. Lett.

[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, 1992, 1993, 1997, 2001) en seis volúmenes y dos ediciones.

[9] M .W. Evans y J.- P. Vigier, "The Enigmatic Photon" (Kluwer, Dordrecht, 1994 - 2002) en cinco volúmenes con encuadernación dura y cinco volúmenes con encuadernación blanda.

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

[11] E. Merzbacher, "Quantum Mechanics" (Wiley, 1970, Segunda Edición).