

PRINCIPIOS BÁSICOS DE LA TEORÍA ECE

UN NUEVO PARADIGMA DE LA FÍSICA

Myron W. Evans, Horst Eckardt, Douglas W. Lindstrom, Stephen J. Crothers

Traducción: Alex Hill

Junio de 2016.

Capítulo 5

La Unificación de la Mecánica Cuántica y la Relatividad General.

5.1 Introducción

La física establecida ha fracasado completamente en la unificación de la mecánica cuántica y la relatividad general, en especial por causa de la indeterminación o incertidumbre, un concepto no baconiano introducido durante la Conferencia Solvay de 1927. Los intentos actuales de unificación, por parte de la física establecida, se concentran alrededor de colisionadores de partículas enormemente caros, y dichos intentos se limitan a la unificación de los campos electromagnético y los nucleares fuerte y débil, dejando por completo afuera a la gravitación.

De manera que resulta razonable inferir que la física establecida jamás será capaz de producir una teoría de campo unificado. En gran contraste, la teoría ECE ha triunfado en la unificación de los cuatro campos fundamentales, a través del empleo de una conocida geometría, desarrollada por Cartan, tal como se ha descrito en los capítulos anteriores de este libro.

Hacia finales del siglo XIX, la física clásica evolucionó gradualmente hacia la relatividad restringida y la vieja teoría cuántica. Los experimentos que condujeron hacia este gran cambio paradigmático en la filosofía natural son bien conocidos, de manera que sólo

requieren que aquí incluyamos una breve descripción de los mismos. Fueron experimentos acerca de la naturaleza de la radiación de banda ancha (cuerpo negro), que condujeron a la ley de Rayleigh Jeans, la distribución de Stefan Boltzmann y similares. El fracaso de la ley de Rayleigh Jeans condujo hacia la distribución de Planck y su inferencia respecto de aquello que posteriormente habría de denominarse fotón. El efecto fotoeléctrico no podía explicarse empujando la física clásica, el movimiento browniano requería de una nueva clase de física estocástica que indicase la existencia de las moléculas, inicialmente propuestas por Dalton. Los calores específicos de los sólidos no podían explicarse adecuadamente a través de la física clásica del siglo XIX. Los espectros atómicos y moleculares no podían explicarse a través de métodos clásicos, en especial el efecto anómalo de Zeeman.

Los experimentos de Michelson y Morley dieron resultados que no podían explicarse utilizando la física clásica newtoniana, de manera que Fitzgerald, en contacto por correspondencia con Heaviside, sugirió una nueva física completamente radical, que posteriormente recibió el nombre de relatividad restringida. La estructura matemática para la relatividad restringida fue casi inferida por Heaviside, pero fue desarrollada por Lorentz y Poincaré. Einstein efectuó posteriormente sus propias contribuciones. Los temas de la relatividad restringida y teoría cuántica comenzaron a desarrollarse velozmente. Las múltiples contribuciones de Sommerfeld han sido típicamente subestimadas en la historia de la ciencia, mientras que aquellas de sus estudiantes y postdoctorados son mejor conocidas. La vieja teoría cuántica evolucionó hacia la ecuación de Schroedinger, luego de la inferencia de de Broglie acerca del dualismo onda-partícula. Peter Debye solicitó a su estudiante Schroedinger que intentase resolver el rompecabezas provocado por el hecho de que una partícula podía actuar como onda y viceversa, y durante esta misma época Compton dio un fuerte impulso al concepto del fotón como partícula, mediante la dispersión de radiación electromagnética de alta frecuencia a partir de una delgada lámina metálica – la dispersión de Compton.

La ecuación de Schroedinger demostró ser en la práctica una descripción precisa de, por ejemplo, fenómenos espectrales en el límite no relativista. En la instancia más sencilla, la ecuación de Schroedinger cuantiza la energía cinética clásica de la partícula libre, y no intenta incorporar la relatividad restringida en la mecánica cuántica. Sommerfeld había efectuado intentos previos, pero persistía el mismo problema, es decir cómo cuantizar la ecuación de la energía de Einstein de la relatividad restringida. Los intentos iniciales de Klein y Gordon generaron resultados con probabilidades negativas, por lo que fueron abandonados por este motivo. Pauli había aplicado su álgebra a la ecuación de Schroedinger, pero ninguno de estos métodos tuvo éxito en la descripción del factor g , el factor de Landé o la precesión de Thomas, en una estructura unificada de mecánica cuántica relativista. Fue célebre la resolución del problema por parte de Dirac, mediante el empleo de matrices de cuatro por cuatro y álgebra de Pauli, pero al así hacerlo se enfrentó al problema de las energías negativas. Dirac sugirió, tentativamente, que las energías negativas podían eliminarse mediante el mar de Dirac, pero esto introducía un inobservable, el mar de Dirac aun no ha sido observado a

nivel experimental. Los inobservables comenzaron a proliferar en la física del siglo XX, reduciéndola a un dogma.

Sin embargo, Dirac adquirió celebridad por su éxito al explicar, dentro de una sola estructura, el factor g del electrón, el factor de Landé, el factor de Thomas y el término de Darwin, y en generar una teoría libre de probabilidades negativas. El mar de Dirac parecía dar origen a antipartículas, las cuales fueron observadas. El mar de Dirac mismo no puede observarse, y el problema de las energías negativas no fue resuelto por Dirac. No queda claro si Dirac llegó a aceptar el principio de incertidumbre, una noción introducida por Bohr y Heisenberg e inmediatamente rechazada por Einstein, Schroedinger, de Broglie y otros, quienes la tildaron de antibaconiana y sin sentido físico. La ecuación de Dirac se reduce a las ecuaciones de Schroedinger y Heisenberg en límites bien definidos, pero el principio de incertidumbre es puro dogma. Su falsedad es fácil de demostrar a nivel experimental, y ha asumido una vida propia que no puede ser descrita como científica. Heisenberg describió la ecuación de Dirac como el momento más bajo en la vida de la física, pero había muchos que describían del mismo modo al principio de incertidumbre. En este capítulo, se demuestra en forma directa la falsedad del principio de incertidumbre, mediante el empleo de conmutadores de orden superior. Se utilizan los propios métodos de Heisenberg para demostrar la falsedad del Principio de Incertidumbre de Heisenberg, una fuente de confusión infinita durante casi noventa años. Uno de los principales resultados de la teoría ECE es el rechazo del Principio de Incertidumbre de Heisenberg en favor de una mecánica cuántica basada en geometría.

El problema de la energía negativa que afectaba la ecuación de Dirac se elimina en este capítulo, al producir la ecuación del fermión de la mecánica cuántica relativista. Esta ecuación no solamente es covariante según Lorentz sino también covariante generalizada, debido a que se obtiene a partir del postulado de la tétrada de una geometría covariante generalizada, la geometría de Cartan. Todas las ecuaciones de la teoría ECE son automáticamente covariantes generalizadas y covariantes según Lorentz en un límite bien definido de la covariancia general. De manera que la ecuación del fermión es la primera ecuación de la mecánica cuántica que se unifica con la relatividad general. Posee las principales ventajas de producir niveles de energía rigurosamente positivos y de ser capaz de expresar la teoría en términos de matrices de dos por dos. La ecuación del fermión produce todo aquello que la ecuación de Dirac es capaz de producir, pero con ventajas fundamentales sobre ésta. De manera que debiera de contemplarse como una mejora respecto de la meritoriamente célebre ecuación de Dirac, una mejora basada en geometría y la teoría de campo unificado ECE. Ésta última, también produce las ecuaciones de d' Alembert y Klein Gordon, y de hecho todas las ecuaciones de onda válidas de la física. Algunas de ellas se comentan en este capítulo.

5.2 La Ecuación del Fermión

La estructura de la teoría ECE es la más fundamental que se conoce en la física en la actualidad, simplemente porque se basa directamente en una geometría rigurosamente correcta. La ecuación del fermión puede expresarse como en el documento UFT 173, publicado en el portal www.aias.us de un modo sucinto:

$$\pi_\mu \psi \sigma^\mu = m c \sigma^1 \psi \quad (5.1)$$

donde el operador del fermión, en representación covariante, se define como:

$$\pi_\mu = (\pi_0, \pi_1, \pi_2, \pi_3) . \quad (5.2)$$

Aquí:

$$\pi_0 = \sigma^0 p_0 , \quad \pi^i = \sigma^3 p_i \quad (5.3)$$

donde p_μ es el 4-vector del momento de energía:

$$p_\mu = (p_0, p_1, p_2, p_3) . \quad (5.4)$$

Las matrices de Pauli se definen mediante:

$$\sigma^\mu = \sigma^0, \sigma^1, \sigma^2, \sigma^3 \quad (5.5)$$

donde:

$$\sigma^0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} , \quad \sigma^1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} , \quad \sigma^2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix} , \quad \sigma^3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (5.6)$$

La *eigen* función de la Ec. (5.1) es la tétrada [1]- [10]:

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_1^R & \psi_2^R \\ \psi_1^L & \psi_2^L \end{bmatrix} \quad (5.7)$$

cuyas entradas se definen por los espinotensores de Pauli de derecha e izquierda:

$$\phi^R = \begin{bmatrix} \psi_1^R \\ \psi_2^R \end{bmatrix}, \phi^L = \begin{bmatrix} \psi_1^L \\ \psi_2^L \end{bmatrix}. \quad (5.8)$$

Esta *eigen* función se conoce como el espinotensor del fermión.

La representación de posición del operador del fermión se define mediante el símbolo δ y es:

$$\delta^\mu = -\frac{i}{\hbar} \pi_\mu. \quad (5.9)$$

Por lo tanto, la ecuación del fermión es la ecuación diferencial de primer orden:

$$i \hbar \delta_\mu \psi \sigma^\mu = mc \sigma^1 \psi. \quad (5.10)$$

Para fines comparativos, el formato covariante de la ecuación de Dirac en representación quirral [24] es:

$$\gamma^\mu \delta_\mu \psi_D = m c \psi_D. \quad (5.11)$$

donde:

$$\psi_D = \begin{bmatrix} \varphi^R \\ \varphi^L \end{bmatrix} \quad (5.12)$$

es un vector columna con cuatro entradas, y donde las matrices de Dirac en representación quirral [24] son:

$$\gamma^\mu = \gamma^0, \gamma^1, \gamma^2, \gamma^3. \quad (5.13)$$

Los detalles completos del desarrollo de la Ec. (5.1) se incluyen en la Nota 172(8) que acompaña el documento UFT 172 en el portal www.aias.us. El ordenamiento de los términos

en la Ec. (5.1) es importante, porque las matrices no son conmutativas, y ψ es una matriz de 2×2 .

El *eigen* valor de energía de la Ec. (5.1) es rigurosamente positivo, nunca negativo. El complejo conjugado de la matriz adjunta del espinotensor del fermión se conoce como el espinotensor adjunto de la ecuación del fermión, y se define como:

$$\psi^+ = \begin{bmatrix} \psi_1^{R*} & \psi_1^{L*} \\ \psi_2^{R*} & \psi_2^{L*} \end{bmatrix}. \quad (5.14)$$

La ecuación adjunta de la Ec. (5.1) se define como:

$$-i \hbar \delta_\mu \psi^+ \sigma^\mu = m c \sigma^1 \psi^+ \quad (5.15)$$

donde se ha utilizado el complejo conjugado de ψ . Estas ecuaciones tienen contrapartes conocidas en la teoría de Dirac [1]- [10], [24] pero en dicha teoría se utilizan las matrices gamma de 4×4 y la definición del espinotensor adjunto es más complicada. La cuatro-corriente de probabilidad de la ecuación del fermión se define como:

$$j^\mu = \frac{1}{2} \text{Tr} (\psi \sigma^\mu \psi^+ + \psi^+ \sigma^\mu \psi) \quad (5.16)$$

y su probabilidad de Born es:

$$j^0 = \psi_1^R \psi_1^{R*} + \psi_2^R \psi_2^{R*} + \psi_1^L \psi_1^{L*} + \psi_2^L \psi_2^{L*} \quad (5.17)$$

que es rigurosamente positiva, como se requiere de una probabilidad. Es igual que la probabilidad de Born de la representación quirál [1]- [10], [24] de la ecuación de Dirac. En esta última la cuatro-corriente se define como:

$$j_D^\mu = \bar{\psi}_D \gamma^\mu \psi_D \quad (5.18)$$

y el espinotensor de Dirac adjunto es un vector de fila de cuatro entradas definido por:

$$\bar{\psi}^D = \psi_D^+ \gamma^0. \quad (5.19)$$

Se muestra a continuación que la cuatro-corriente de probabilidad de la ecuación del fermión se conserva:

$$\delta_{\mu} j^{\mu} = 0. \quad (5.20)$$

Para demostrar este resultado se multiplican ambos lados de la Ec. (5.1) desde la derecha con ψ^{+} :

$$i \hbar \delta_{\mu} \psi \sigma^{\mu} \psi^{+} = m c \sigma^1 \psi \psi^{+}. \quad (5.21)$$

Multiplicamos ambos lados de la Ec. (5.15) desde la derecha con ψ :

$$-i \hbar \delta_{\mu} \psi^{+} \sigma^{\mu} \psi = m c \sigma^1 \psi^{+} \psi \quad (5.22)$$

y restamos la Ec. (5.22) de la Ec. (5.21):

$$i \hbar \delta_{\mu} (\psi \sigma^{\mu} \psi^{+} + \psi^{+} \sigma^{\mu} \psi) = m c \sigma^1 (\psi \psi^{+} - \psi^{+} \psi). \quad (5.23)$$

Por definición:

$$\psi \psi^{+} - \psi^{+} \psi = \begin{bmatrix} \psi_1^R & \psi_2^R \\ \psi_1^L & \psi_2^L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1^{R*} & \psi_1^{L*} \\ \psi_2^{R*} & \psi_2^{L*} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \psi_1^{R*} & \psi_1^{L*} \\ \psi_2^{R*} & \psi_2^{L*} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1^R & \psi_2^R \\ \psi_1^L & \psi_2^L \end{bmatrix} \quad (5.24)$$

de manera que

$$\text{Traza} (\psi \psi^{+} - \psi^{+} \psi) = 0. \quad (5.25)$$

Por lo tanto:

$$\text{Traza} (\delta_{\mu} (\psi \sigma^{\mu} \psi^{+} - \psi^{+} \sigma^{\mu} \psi)) = 0 \quad (5.26)$$

y

$$\delta_{\mu} j^{\mu} = 0. \quad (5.27)$$

Q. E. D.

La ecuación del fermión (5.1) puede expandirse en dos ecuaciones simultáneas:

$$(E + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \varphi^L = mc^2 \varphi^R \quad (5.28)$$

$$(E - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \varphi^R = mc^2 \varphi^L \quad (5.29)$$

en donde E y \mathbf{p} son los operadores de mecánica cuántica:

$$E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad \mathbf{p} = -i\hbar \nabla. \quad (5.30)$$

Las Ecs. (5.28) y (5.29) pueden desarrollarse como:

$$(E - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(E + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \varphi^L = m^2 c^4 \varphi^L \quad (5.31)$$

$$(E + c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(E - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \varphi^R = m^2 c^4 \varphi^R \quad (5.32)$$

de las cuales surgen ecuaciones tales como:

$$(E^2 - c^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \varphi^R = m^2 c^4 \varphi^R. \quad (5.33)$$

Utilizando los postulados cuánticos, esto deviene la ecuación de onda:

$$\left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \right) \varphi^R = 0 \quad (5.34)$$

y se vuelve claro que la ecuación del fermión es una factorización de la ecuación de onda ECE:

$$\left(\square + \left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2 \right) \psi = 0 \quad (5.35)$$

cuya *eigen* función es la tétrada (ψ).

Por lo tanto, la ecuación del fermión se obtiene a partir del postulado de la tetrada y la geometría de Cartan. La tetrada viene definida por:

$$\begin{bmatrix} V^R \\ V^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_1^R & \psi_2^R \\ \psi_1^L & \psi_2^L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V^1 \\ V^2 \end{bmatrix} \quad (5.36)$$

es decir, como una matriz que relaciona dos vectores columna.

El operador P de paridad actúa sobre el espinotensor del fermión como sigue:

$$P\psi = \begin{bmatrix} \psi_1^L & \psi_2^L \\ \psi_1^R & \psi_2^R \end{bmatrix} \quad (5.37)$$

y el antifermión se obtiene en forma directa a partir de la ecuación del fermión, al operar sobre cada término con P como sigue:

$$P(E) = E, \quad P(\mathbf{p}) = -\mathbf{p}, \quad P \begin{bmatrix} \psi_1^R & \psi_2^R \\ \psi_1^L & \psi_2^L \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_1^L & \psi_2^L \\ \psi_1^R & \psi_2^R \end{bmatrix}. \quad (5.38)$$

Nótese cuidadosamente que los *eigen* estados de energía son siempre positivos, tanto en la ecuación del fermión como del anti-fermión. El anti-fermión se obtiene a partir del fermión invirtiendo la helicidad:

$$P(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = -\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \quad (5.39)$$

y tiene paridad opuesta a la del fermión, la misma masa que el fermión y la carga eléctrica opuesta. El fermión estático es indistinguible del anti-fermión estático [24]. De manera que se conserva la simetría CPT como sigue del fermión al anti-fermión:

$$CPT \rightarrow (-C)(-P) \quad (5.40)$$

donde C es el operador de conjugación de carga y T es el operador de inversión de movimiento. Nótese cuidadosamente que no hay energía negativa en ninguna parte del análisis. El par de ecuaciones simultáneas (5.28) y (5.29) pueden expresarse como:

$$(E - c\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(E + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \varphi^L = m^2 c^4 \varphi^L \quad (5.41)$$

una ecuación que puede reordenarse como:

$$(E^2 - m^2 c^4) \varphi^L = c^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \varphi^L \quad (5.42)$$

y factorizada para dar:

$$(E - mc^2)(E + mc^2) \varphi^L = c^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \varphi^L. \quad (5.43)$$

Si \mathbf{p} tiene un valor real, el álgebra de Pauli significa que:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = p^2 \quad (5.44)$$

de manera que si E y \mathbf{p} se consideran como funciones, y no como operadores, la Ec. (5.43) deviene la ecuación de la energía de Einstein:

$$E^2 - m^2 c^4 = c^2 p^2 \quad (5.45)$$

multiplicada por φ^L de ambos lados. Es bien sabido [1]- [10] que la ecuación de energía de Einstein es una forma de expresar la energía y el momento relativista:

$$E = \gamma mc^2, \quad (5.46)$$

$$\mathbf{p} = \gamma m\mathbf{v}. \quad (5.47)$$

Comprendiendo esto, la Ec. (5.43) puede linealizarse como sigue. Primero se expresa como:

$$(E - mc^2) \varphi^L = \frac{c^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{E + mc^2} \varphi^L \quad (5.48)$$

y se aproxima la energía total:

$$E = \gamma mc^2 \quad (5.49)$$

a través de la energía en reposo:

$$E \approx mc^2, \quad (5.50)$$

y entonces la Ec. (5.48) deviene:

$$(E - mc^2) \varphi^L = \frac{1}{2m} c^2 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \varphi^L \quad (5.51)$$

que posee la estructura de la ecuación de Schroedinger de la partícula libre:

$$E_{NR} \varphi^L = \frac{p^2}{2m} \varphi^L \quad (5.52)$$

en donde el límite no relativista de la energía cinética se define en el límite $v \ll c$ por:

$$E_{NR} = E - mc^2 = (\gamma - 1) mc^2 \rightarrow \frac{p^2}{2m}. \quad (5.53)$$

De manera que la ecuación del fermión se reduce correctamente a la ecuación de Schroedinger no relativista de la partícula libre, Q. E. D.

La gran importancia de la ecuación del fermión en el campo de la química física emerge del hecho de que puede describir los fenómenos para los cuales la ecuación de Dirac es merecidamente célebre, mientras que al mismo tiempo elimina el problema de la energía negativa, como acabamos de ver. En la teoría de campo cuántico esto conduce a una teoría de campo cuántico del fermión libre. Esta meta es muy difícil de lograr [24] en la teoría de campo cuántico tradicional, porque deben desarrollarse métodos que manejen la energía negativa. Esto último se debe simplemente a la elección que hizo Dirac de las matrices gamma. La forma en la que la ecuación del fermión describe el factor g del electrón, el factor de Landé, el factor de Thomas y el término de Darwin se describe en la siguiente sección.

5.3 Interacción del Fermión ECE con el Campo Electromagnético.

La forma más sencilla y poderosa de describir esta interacción para cada índice de polarización a de la teoría ECE es a través de la prescripción mínima

$$p^\mu \rightarrow p^\mu - eA^\mu \quad (5.54)$$

donde se utiliza un signo negativo [24] porque la carga en el electrón es $-e$. La Ec. (5.54) puede expresarse como:

$$E \rightarrow E - e\varphi \quad (5.55)$$

y:

$$\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - e\mathbf{A}. \quad (5.56)$$

Utilizando las Ecs. (5.55) y (5.56) en la ecuación de energía de Einstein (5.45) nos da:

$$(E - e\varphi)^2 = c^2(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + m^2c^4 \quad (5.57)$$

que puede factorizarse como sigue:

$$(E - e\varphi - m c^2) (E - e\varphi + m c^2) = c^2(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 \quad (5.58)$$

y expresada como:

$$E = mc^2 + e\varphi + c^2 \frac{(\mathbf{p} - e\mathbf{A})}{(E - e\varphi + mc^2)} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \quad (5.59)$$

en una forma ya lista para cuantización. Esto último se lleva a cabo con:

$$\mathbf{p} \rightarrow -i \hbar \nabla \quad (5.60)$$

y produce muchos conocido efectos, así como nuevos efectos de acoplamiento de órbita de espín descritos en documentos acerca de la teoría ECE, tales como el UFT 248, publicado en el portal www.aias.us. El resultado más célebre de la ecuación de Dirac, y de su versión mejorada, la ecuación ECE del fermión, es la resonancia de espín del electrón, la cual depende del empleo de las matrices de Pauli, como es bien sabido. En esta sección, se explican sistemáticamente las diversas partes intrincadas de esta célebre deducción. La resonancia de espín electrónico se produce en presencia de un campo magnético estático, de

manera que el potencial escalar puede omitirse de ser considerado, dejando hamiltonianos tales como:

$$H_2\psi = \frac{1}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla - e\mathbf{A}) \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})) \psi. \quad (5.61)$$

Nótese cuidadosamente que el operador ∇ actúa sobre la función de onda, la cual se denota como ψ por facilidad de notación. El siguiente tipo de álgebra de Pauli:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{V} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{W} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{W} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{V} \times \mathbf{W} \quad (5.62)$$

conduce a:

$$H_2\psi = \frac{1}{2m} (ie\hbar (\nabla \cdot \mathbf{A} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \mathbf{A}) - \hbar^2 (\nabla^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times \nabla) + e^2 (A^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{A}) + ie\hbar (\mathbf{A} \cdot \nabla + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \nabla))) \psi. \quad (5.63)$$

Suponiendo que \mathbf{A} posee un valor real, entonces:

$$\mathbf{A} \times \mathbf{A} = \mathbf{0}. \quad (5.64)$$

También:

$$\nabla \times \nabla = \mathbf{0} \quad (5.65)$$

de manera que:

$$H_2 \psi = \frac{1}{2m} (-\hbar^2 \nabla^2 \psi + e^2 A^2 \psi + ie\hbar \nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) - e\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times (\mathbf{A}\psi) + ie\hbar \mathbf{A} \cdot \nabla \psi - e\hbar \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \nabla \psi). \quad (5.66)$$

Puede observarse que la ecuación del fermión produce muchos efectos en general, todos los cuales son observables a nivel experimental. De manera que se trata de un resultado muy poderoso de la geometría y de la teoría ECE de campo unificado. Pueden considerarse efectos gravitacionales a través de la prescripción mínima adecuada, tal como en documentos como

el UFT 248. Muchos de estos efectos aun deben de observarse. La resonancia de espín electrónico viene dada por el término:

$$\begin{aligned}
 H_2\psi &= -\frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\nabla\times(\mathbf{A}\psi)+\mathbf{A}\times\nabla\psi)+\dots \\
 &= -\frac{e\hbar}{2m}\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{B}+\dots
 \end{aligned}
 \tag{5.67}$$

donde se ha utilizado la relación habitual entre \mathbf{B} y \mathbf{A} para ilustrar el argumento:

$$\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}. \tag{5.68}$$

En la teoría ECE rigurosa, la conexión de espín entra al análisis. Un amplio campo temático nuevo de la química física emerge, porque la resonancia de espín electrónico (REE) y la resonancia magnética nuclear (RMN) dominan los temas de la química física y la química analítica. El uso de un potencial con valor complejo, tal como aquel en un campo electromagnético en lugar de un campo magnético estático, produce muchos más efectos a través de la ecuación:

$$\begin{aligned}
 ((E - e\varphi) + c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{p} - e\mathbf{A}))((E - e\varphi) - c\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{p} - e\mathbf{A}^*))\varphi^R \\
 = m^2 c^4 \varphi^R,
 \end{aligned}
 \tag{5.69}$$

$$\psi := \varphi^R,$$

es decir,

$$\begin{aligned}
 (E - e\varphi - mc^2)(E - e\varphi + mc^2)\psi \\
 = c^2\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{p} - e\mathbf{A}^*)\psi + ec(E - e\varphi)\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{A}^* - \mathbf{A})\psi
 \end{aligned}$$

donde * denota complejos conjugados. La Ec. (5.69) puede linealizarse como:

$$\begin{aligned}
 (E - e\varphi - mc^2)\psi &= \frac{c^2\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{p} - e\mathbf{A})\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{p} - e\mathbf{A}^*)}{E - e\varphi + mc^2}\psi \\
 &+ \frac{ec(E - e\varphi)}{E - e\varphi + mc^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot(\mathbf{A}^* - \mathbf{A})\psi
 \end{aligned}
 \tag{5.70}$$

y reordenada como sigue:

$$E\psi = (e\varphi + mc^2)\psi + \frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \left(1 - \frac{e\varphi}{2mc^2}\right)^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}^*)\psi + \frac{e}{2mc^2}(mc^2 - e\varphi) \left(1 - \frac{e\varphi}{2mc^2}\right)^{-1} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A}^* - \mathbf{A})\psi. \quad (5.71)$$

En la aproximación:

$$e\varphi \ll mc^2 \quad (5.72)$$

la Ec. (4.71) da:

$$E\psi = (H_1 + H_2 + H_3)\psi \quad (5.73)$$

donde los tres hamiltonianos se definen como sigue:

$$H_1 = E\varphi + mc^2, \quad (5.74)$$

$$H_2 = \frac{1}{2m}\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \left(1 + \frac{e\varphi}{2mc^2}\right) \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}^*), \quad (5.75)$$

$$H_3 = \frac{1}{2}ec \left(1 + \frac{e\varphi}{2mc^2}\right) \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A}^* - \mathbf{A}), \quad (5.76)$$

lo cual conduce a muchos nuevos efectos de resonancia fermiónica utilizando el campo electromagnético en lugar del campo magnético estático. Por ejemplo, el hamiltoniano H_2 puede desarrollarse como:

$$H_{21}\psi = \frac{1}{2m} \left(ie\hbar (\boldsymbol{\nabla} \cdot \mathbf{A}^* + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}^* - \hbar^2(\nabla^2 + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla})) + e^2(\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^* + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{A}^*) + ie\hbar (\mathbf{A} \cdot \boldsymbol{\nabla} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \boldsymbol{\nabla})) \right) \psi, \quad (5.77)$$

una ecuación que puede expresarse como:

$$H_{21}\psi = \frac{1}{2m} (ie^2\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{A}^*\psi - e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \nabla\psi - e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\psi \times \mathbf{A}^* - e\hbar\boldsymbol{\sigma} \cdot (\nabla \times \mathbf{A}^*)\psi + \dots), \quad (5.78)$$

dando cuatro, de un total de muchos términos que pueden producir novedosos efectos de resonancia fermiónica. Utilizando, por fines argumentales:

$$\mathbf{B}^* = \nabla \times \mathbf{A}^* \quad (5.79)$$

entonces el hamiltoniano se reduce a:

$$H_{211} = -\frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}^* \quad (5.80)$$

y un término debido al producto conjugado del campo electromagnético:

$$H_{212} = i\frac{e^2}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{A}^* \quad (5.81)$$

el cual define el campo $\mathbf{B}^{(3)}$ ya introducido en los capítulos previos:

$$\mathbf{B}^{(3)*} = -ig\mathbf{A} \times \mathbf{A}^* = -ig\mathbf{A}^{(1)} \times \mathbf{A}^{(2)}. \quad (5.82)$$

La Ec. (5.81) es el hamiltoniano que define la resonancia fermiónica inducida radiativamente (RFR), comentada extensivamente en otras partes [1]- [10] pero deducida aquí de una manera rigurosa a partir de la ecuación del fermión o representación quiral de la ecuación de Dirac. El acoplamiento órbita espín y el factor de Thomas pueden deducirse a partir del hamiltoniano H_{22} definido como sigue:

$$H_{22}\psi = \frac{e}{4m^2c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \psi \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A})) \psi. \quad (5.83)$$

Este hamiltoniano posee sus orígenes en la siguiente ecuación:

$$E\psi = \left(\frac{mc^2 + e\varphi + c^2(\mathbf{p} - e\mathbf{A})}{E - e\varphi + mc^2} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \right) \psi \quad (5.84)$$

en la aproximación:

$$E = \gamma mc^2 \approx mc^2. \quad (5.85)$$

En esta aproximación, la Ec. (5.84) deviene:

$$E\psi = \left(mc^2 + e\varphi + \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \left(1 - \frac{e\varphi}{2mc^2} \right)^{-1} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \right) \psi \quad (5.86)$$

y en la aproximación:

$$e\varphi \ll 2mc^2 \quad (5.87)$$

el hamiltoniano H_{22} se recupera como el último término del lado derecho de la igualdad. En la deducción del término de acoplamiento orbital de espín se efectúan varias suposiciones, pero que no siempre se aclaran en los libros de texto. El potencial vectorial \mathbf{A} no se considera en la deducción de la interacción orbital de espín, de manera que sólo se consideran efectos de campo eléctrico. Por lo tanto, el hamiltoniano relevante se reduce a:

$$H_{22} \psi = \frac{e}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi. \quad (5.88)$$

Se supone que el primer \mathbf{p} es el operador:

$$\mathbf{p} = -i\hbar\nabla \quad (4.89)$$

pero que el segundo \mathbf{p} es una función. Este punto raramente se menciona en los libros de texto. Esta suposición puede justificarse sobre la base de que parece tener éxito en la descripción de los datos experimentales. Cuando se efectúa dicha suposición, la Ec. (5.88) se reduce a:

$$H_{22} \psi = - \frac{i\hbar}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi. \quad (5.90)$$

El operador ∇ actúa sobre $\varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\psi$, de manera que, por el Teorema de Leibnitz:

$$\nabla (\varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\psi) = \nabla (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})\varphi\psi + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \nabla(\varphi\psi) \quad (5.91)$$

y el término de la interacción orbital de espín surge a partir de:

$$H_{22} \psi = -\frac{i\hbar}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla(\varphi\psi) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}). \quad (5.92)$$

En esta ecuación, la Teorema de Leibnitz afirma que:

$$\nabla (\varphi \psi) = (\nabla\varphi) \psi + \varphi (\nabla\psi) \quad (4.93)$$

de manera que el término de interacción orbital de espín es:

$$H_{22} \psi = -\frac{i\hbar}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla\varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \psi + \dots \quad (5.94)$$

Se observa que la Ec. (5.94) es sólo uno de muchos efectos posibles que surgen a partir de la ecuación del fermión, y que debiera de investigarse sistemáticamente a nivel experimental. En el desarrollo del término orbital de espín, la física establecida y obsoleta se utiliza como sigue:

$$\mathbf{E} = -\nabla\varphi \quad (5.95)$$

de manera que el hamiltoniano orbital de espín deviene:

$$H_{22}\psi = -\frac{i\hbar}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}\psi. \quad (5.96)$$

Ahora utilizamos el álgebra de Pauli:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{E} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} \quad (5.97)$$

de manera que la parte real del hamiltoniano a partir de estas ecuaciones deviene:

$$H_{22} \psi = \frac{e\hbar}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{E} \times \mathbf{p} \psi \quad (5.98)$$

en donde se considera a \mathbf{p} como una función, y no como operador. Si esta segunda \mathbf{p} se considera como operador, entonces aparecen nuevos efectos. Nótese cuidadosamente que en la deducción del efecto Zeeman, REE, RMN y el factor g del electrón, se considera a ambas \mathbf{p} 's como operadores, pero en la deducción de la interacción orbital de espín, sólo la primer \mathbf{p} se considera como un operador, y la segunda \mathbf{p} se considera como función. Finalmente, en la deducción habitual de la interacción orbital de espín, se selecciona al potencial de Coulomb de la electrostática como el potencial escalar:

$$\varphi = - \frac{e}{4\pi_0 r} \quad (5.99)$$

de manera que la fuerza de campo eléctrico es:

$$\mathbf{E} = - \nabla \varphi = - \frac{e}{4\pi_0 r^3} \mathbf{r}. \quad (5.100)$$

El hamiltoniano de órbita de espín relevante deviene:

$$H_{22} \psi = - \frac{e}{8\pi c^2 \epsilon_0 r^3} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{p} \psi \quad (4.101)$$

en el cual el momento angular orbital es:

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (5.102)$$

Por lo tanto, el hamiltoniano de órbita de espín es:

$$H_{22} \psi = - \frac{e^2 \hbar}{8\pi c^2 \epsilon_0 m^2 r^3} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \psi. \quad (5.103)$$

En la descripción de espectros atómicos y moleculares, el momento angular de espín se define como:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma} \quad (5.104)$$

y el momento angular orbital también deviene un operador. Así:

$$H_{22} \psi = -\zeta \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} = -\frac{e^2}{8\pi c^2 \epsilon_0 m^2 r^3} \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \psi \quad (5.105)$$

y el factor de Thomas igual a 2 viene contenido en la Ec. (5.105), como parte del denominador. La deducción del factor de Thomas es una de las fortalezas de la ecuación del fermión. La cual como hemos mencionado no sufre del problema de la energía negativa como lo hace la ecuación de Dirac. Consideremos nuevamente el hamiltoniano H_{22} :

$$H_{22} \psi = \frac{e}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \psi \quad (5.106)$$

y supogamos que:

$$\mathbf{A} = \mathbf{0} \quad (5.107)$$

de manera que:

$$H_{22} \psi = \frac{e}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi \quad (5.108)$$

En la deducción del acoplamiento órbita-espín y el factor de Thomas, se considera al primer \mathbf{p} como operador, y al segundo \mathbf{p} como función. En la deducción del término de Darwin, se considera a ambos \mathbf{p} 's como operadores, definidos por:

$$-i\hbar \nabla \psi = \mathbf{p} \psi \quad (5.109)$$

con un valor esperado:

$$\langle \mathbf{p} \rangle = \int \psi^* \mathbf{p} \psi d\tau. \quad (5.110)$$

Por lo tanto, el término de Darwin se obtiene de:

$$H_{22} \psi = \frac{e}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i \hbar \nabla) \varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot (-i \hbar \nabla) \psi \quad (5.111)$$

y es un fenómeno de la mecánica cuántica, sin contraparte clásica.

A partir de la Ec. (5.111):

$$H_{22} \psi = - \frac{e \hbar^2}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) \psi \quad (5.112)$$

y el primer operador del ∇ opera sobre todo lo que sigue, de manera que:

$$H_{22} \psi = - \frac{e \hbar^2}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (\varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi). \quad (5.113)$$

El Teorema de Leibnitz se utiliza como sigue:

$$\nabla (\varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) = (\nabla \varphi) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) + \varphi \nabla (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla). \quad (5.114)$$

Por lo tanto:

$$H_{22} \psi = - \frac{e \hbar^2}{4m^2 c^2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi + \boldsymbol{\sigma} \cdot \varphi \nabla (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi)). \quad (5.115)$$

Por lo general, se consider que el término de Darwin es:

$$H_{\text{Darwin}} \psi = - \frac{e \hbar^2}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi. \quad (5.116)$$

y el segundo término en la Ec. (5.115) puede desarrollarse como:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi) = (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) \psi \quad (5.117)$$

de manera que:

$$H_{22} \psi = -\frac{e\hbar^2}{4m^2c^2} (\nabla\phi \cdot \nabla\psi + \phi\nabla^2\psi). \quad (5.118)$$

5.4 Nuevos Efectos de la Orbita de Espín del Electrón a partir de la Ecuación del Fermión.

En el nivel clásico habitual, consideremos la energía cinética de un electrón de masa m y momento lineal \mathbf{p} :

$$H = \frac{p^2}{2m} \quad (5.119)$$

y utilicemos la prescripción mínima (5.56) para describir la interacción de un electrón con un potencial vectorial \mathbf{A} . El hamiltoniano de interacción se define mediante:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \quad (5.120) \\ &= \frac{p^2}{2m} - \frac{e}{2m} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2 A^2}{2m}. \end{aligned}$$

Tal como se comentó en capítulos previos, el potencial vectorial puede definirse mediante:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}. \quad (5.121)$$

Consideremos ahora el siguiente término del hamiltoniano:

$$H_1 = -\frac{e}{2m} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) = -\frac{e}{4m} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{r} + \mathbf{B} \times \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) \quad (5.122)$$

donde el momento angular orbital puede definirse como sigue:

$$\mathbf{p} \cdot (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) = \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{L}. \quad (5.123)$$

Este análisis produce el conocido hamiltoniano para la interacción del momento de un dipolo magnético con la densidad de flujo magnético:

$$H_1 = -\frac{e}{2m} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} = -\mathbf{m}_D \cdot \mathbf{B}. \quad (5.124)$$

El hamiltoniano clásico responsable de la Ec. (5.124) es:

$$H_1 = -\frac{e}{2m} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) \quad (5.125)$$

que puede expresarse en la base SU (2) como:

$$H_1 = -\frac{e}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}). \quad (5.126)$$

Utilizando álgebra de Pauli:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{A} \quad (5.127)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{p} \quad (5.128)$$

y se obtiene el mismo resultado, porque:

$$i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{A} + \mathbf{A} \times \mathbf{p}) = 0. \quad (5.129)$$

Sin embargo, como fue comentado por ejemplo por H. Merzbacher en el libro titulado *Quantum Mechanics* (Wiley, 1970):

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}) \quad (5.130)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}) \quad (5.131)$$

en donde:

$$\frac{1}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} = 1. \quad (5.132)$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \mathbf{r} \cdot \mathbf{A} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \mathbf{r} \cdot \mathbf{A} \\ + i \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}). \end{aligned} \quad (5.133)$$

A partir de una comparación entre las partes real e imaginaria de las Ecs. (5.127) y (5.133):

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \mathbf{r} \cdot \mathbf{A} - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}) \quad (5.134)$$

en donde:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{A} = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \mathbf{r} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}, \quad (5.135)$$

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{r} = 0. \quad (5.136)$$

Por lo tanto, obtenemos las importantes identidades:

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = -\frac{1}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}, \quad (5.137)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{A} = \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}. \quad (5.138)$$

Por lo tanto, el hamiltoniano (5.125) puede expresarse como:

$$H_1 = -\frac{e}{m} \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \frac{e}{mr^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A} = -\mathbf{m}_B \cdot \mathbf{B}. \quad (5.139)$$

Finalmente, utilizamos las Ecs. (5.121) y (5.139) para encontrar:

$$H_1 = \frac{e}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r^2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \right) = -\mathbf{m}_B \cdot \mathbf{B}. \quad (5.140)$$

Puede observarse que el conocido hamiltoniano responsable del efecto Zeeman se ha transformado en un hamiltoniano que da resonancia de espín electrónico de una nueva clase, una resonancia que surge de la interacción de la matriz de Pauli con el campo magnético, como en la Ec. (5.140). Si el campo magnético está alineado según el eje Z, entonces:

$$\sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (5.141)$$

y la frecuencia de resonancia de la órbita de espín electrónico (ESOR) es:

$$\omega = \frac{eB}{m\hbar} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}. \quad (5.142)$$

Esto se compara con la típica frecuencia de REE (resonancia de espín electrónico):

$$\omega = \frac{eB}{m} \quad (5.143)$$

mediante el hamiltoniano ya deducido en este capítulo a partir de la ecuación del fermión. El hamiltoniano de ESOR contiene un novedoso acoplamiento de órbita-espín cuando se cuantiza:

$$H_1 \psi = \frac{e}{m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \psi. \quad (5.144)$$

Definiendo el momento angular de espín como:

$$\mathbf{S} = \frac{1}{2} \hbar \boldsymbol{\sigma} \quad (5.145)$$

nos da [1]-[10]:

$$\begin{aligned} \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} \psi &= \frac{1}{2} (J^2 - L^2 - S^2) \psi \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \psi \end{aligned} \quad (5.146)$$

de manera que los niveles de energía del operador hamiltoniano de ESOR son:

$$E = \frac{e\hbar}{2m} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \quad (5.147)$$

dando la frecuencia de ESOR:

$$\omega = \frac{e\hbar}{2m} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \quad (5.148)$$

en donde el momento angular total J se define a través de la serie de Clebsch Gordan:

$$J = L + S, L + S - 1, \dots, |L - S|. \quad (5.149)$$

La Ec. (5.144) se dedujo por primera vez en el documento UFT 249 y resulta diferente del conocido hamiltoniano de espín de REE:

$$H_{ESR} = -\frac{e}{2m} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} + \lambda \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} - \frac{e}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} = -g_{\text{Spin}} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}. \quad (5.150)$$

Se dedujo mediante el empleo de un álgebra de Pauli conocida, junto con la ecuación del fermión, y potencialmente da origen a muchos efectos espectrales de utilidad. Por lo tanto, para químicos físicos y para químicos analíticos, el formato más útil de la ecuación del fermión es:

$$E\psi = \left(mc^2 + e\varphi + \frac{1}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \left(1 + \frac{e\varphi}{2mc^2} \right) \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \right) \psi \quad (5.151)$$

y se han incluido en este capítulo algunos ejemplos de su utilidad. En la teoría ECE, se ha deducido la Ec. (5.151) a partir de geometría de Cartan y por el empleo de la prescripción mínima. Tal como ya se comentó, la ecuación del fermión es la ecuación quiral de Dirac sin los problemas de energía negativa, los cuales para los químicos nunca revistieron mucho interés. En el campo de la química, el tema se enfoca de la siguiente manera. Consideremos un término de la ecuación completa (5.151):

$$H_1 \psi = -\frac{e}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}) \psi. \quad (5.152)$$

Al considerar a $\boldsymbol{\sigma}$ como una función, más que como un operador, este término puede desarrollarse mediante el empleo de álgebra de Pauli como sigue:

$$H_1 \psi = -\frac{e}{2m} (\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{A} \times \mathbf{p} + \mathbf{p} \times \mathbf{A})) \psi. \quad (5.153)$$

Para un campo magnético uniforme:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad (5.154)$$

de manera que:

$$H_1 \psi = -\frac{e}{4m} (\mathbf{B} \times \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + \mathbf{p} \cdot \mathbf{B} \times \mathbf{r} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot ((\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \times \mathbf{p} + \mathbf{p} \times (\mathbf{B} \times \mathbf{r}))) \psi. \quad (5.155)$$

Al considerar a \mathbf{p} como una función:

$$\mathbf{B} \times \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{B} \cdot \mathbf{L} \quad (5.156)$$

de manera que el hamiltoniano deviene:

$$H_1 \psi = -\frac{e}{2m} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} \psi + (i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{A}) \psi. \quad (5.157)$$

A esta altura, se considera a \mathbf{p} como un operador, de manera que el segundo término del lado derecho de la igualdad de la Ec. (5.157) no desaparece. El empleo de \mathbf{p} y σ como funciones u operadores resulta arbitrario, y justificado sólo por la comparación final con los datos experimentales. A partir de las Ecs. (5.157) y (5.154) puede expresarse el hamiltoniano en el formato utilizado en química

$$\begin{aligned} H_1 \psi &= \left(-\frac{e}{2m} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} - \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} \right) \psi \\ &= -\frac{e}{2m} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \psi \end{aligned} \quad (5.158)$$

El momento angular total se conserva, de manera que la Ec. (5.158) puede expresarse como:

$$H_1 \psi = -\frac{e}{2m} g_L \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} \psi \quad (5.159)$$

donde:

$$J = L + S, \dots, |L - S| \quad (5.160)$$

a partir de la serie de Clebsch Gordan.

El término de órbita de espín convencional surge, como ya se describió antes en este capítulo, a partir de otro término del hamiltoniano:

$$H_{so} \psi = -\frac{e}{4mc^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot (\mathbf{p} - e\mathbf{A}) \psi \quad (5.161)$$

en donde el primer \mathbf{p} se describe como un operador pero en donde el segundo \mathbf{p} es una función, dando el término de órbita de espín:

$$H_{so} \psi = -\frac{ie\hbar}{4m^2c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi. \quad (5.162)$$

De manera que el hamiltoniano completo de REE es:

$$H \psi = \left(-\frac{e}{2m} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} - \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \zeta \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \right) \psi \quad (5.163)$$

en donde la constante de acoplamiento órbita espín es:

$$\zeta = \frac{e}{4\pi c^2 \epsilon_0 m^2 r^3}. \quad (5.164)$$

Finalmente, tanto \mathbf{S} como \mathbf{L} son operadores, de manera que:

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \psi = \frac{\hbar^2}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \psi. \quad (5.165)$$

La anterior es la conocida descripción convencional de REE en el lenguaje utilizado por los químicos, y es una descripción basada en la teoría ECE y en geometría. En la teoría ECE puede desarrollarse de muchas maneras, porque es covariante generalizada, mientras que la obsoleta descripción tradicional es covariante según Lorentz. Sin embargo, pueden desarrollarse varias nuevas espectroscopías utilizando una conocida álgebra de Pauli, una que pareciera nunca haber sido aplicada para espectroscopías de resonancia del fermión:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}), \quad (5.166)$$

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}). \quad (5.167)$$

Para un campo magnético uniforme:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (5.168)$$

de manera que

$$\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{r} \quad (4.169)$$

y

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{A} = \frac{1}{r^2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A} \quad (5.170)$$

como en la Nota 250(7) que acompaña el documento UFT 250, publicado en el portal www.aias.us. Utilizando estos resultados, se encuentra que:

$$\begin{aligned} H_1 \psi &= -\frac{e}{2m} (\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) \psi \\ &= -\frac{e}{mr^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \times \mathbf{r} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \psi. \end{aligned} \quad (5.171)$$

Utilizando la Ec. (5.171) para un campo magnético uniforme, se obtiene:

$$\mathbf{A} \times \mathbf{r} = \frac{1}{2} (\mathbf{B} \times \mathbf{r}) \times \mathbf{r} = \frac{1}{2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{B}) - r^2 \mathbf{B} \quad (5.172)$$

dando lugar a un nuevo hamiltoniano de órbita de espín en la forma de gran utilidad:

$$H_1 \psi = \frac{e}{\hbar m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \left(\mathbf{B} - \frac{\mathbf{r}}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{B}) \right) \mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \psi. \quad (5.173)$$

Su valor esperado es:

$$\langle H_1 \rangle = \frac{e}{\hbar m} \int \psi^* H_1 \psi \, d\tau \quad (5.174)$$

con la normalización:

$$\int \psi^* \psi \, d\tau = 1. \quad (5.175)$$

Utilizando el resultado:

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \psi = \frac{\hbar^2}{2} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \psi \quad (5.176)$$

los *eigen* valores de energía del hamiltoniano son:

$$E = \frac{e\hbar}{2m} (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \quad (5.177)$$

$$\left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} - \int \psi^* \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r^2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{B} \psi d\tau \right)$$

como en la Nota 250(9) que acompaña el documento UFT 250 en el portal www.aias.us .
En coordenadas polares esféricas:

$$\begin{aligned} X &= r \sin \theta \cos \varphi \\ Y &= r \sin \theta \sin \varphi \\ Z &= r \cos \theta \end{aligned} \quad (5.178)$$

y la integración de una función sobre todo el espacio significa:

$$\int f d\tau = \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{2\pi} \int_0^{\infty} f r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi. \quad (5.179)$$

Si el campo magnético está alineado según el eje Z, entonces, en coordenadas cartesianas:

$$\frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r^2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{B} = \sigma_z B_z \frac{Z^2}{X^2 + Y^2 + Z^2} \quad (5.180)$$

y si se supone que, en promedio:

$$\left\langle \frac{Z^2}{X^2 + Y^2 + Z^2} \right\rangle = \frac{1}{3} \quad (5.181)$$

la Ec. (5.177) se reduce a:

$$E = \frac{1}{3} \frac{e\hbar}{m} \sigma_z B_z (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)) \quad (5.182)$$

y se produce una resonancia de órbita de espín electrónico en:

$$\omega = \frac{2}{3} \frac{e}{m} B_Z (J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)). \quad (5.183)$$

En coordenadas esféricas:

$$\frac{Z^2}{X^2+Y^2+Z^2} = \cos^2 \theta \quad (5.184)$$

de manera que:

$$\int \psi^* \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r^2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{B} \psi \, d\tau \quad (5.185)$$

$$= \sigma_Z B_Z \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{2\pi} \int_0^\infty \psi^* \cos^2 \theta \, \varphi \, r^2 \, \text{sen} \theta \, dr \, d\theta \, d\varphi.$$

Se observa que esta parte del hamiltoniano es dependiente de r y debe de evaluarse para cada función de onda ψ . Las únicas funciones de onda analíticas son aquellas del hidrógeno atómico, de manera que pueden utilizarse métodos computacionales para evaluar los niveles de energía de la Ec. (5.185) para el átomo de hidrógeno. Los resultados se han incluido en el documento UFT 250, publicado en el portal www.aias.us. Como ejemplo, mostramos las dos contribuciones de la Ec. (5.177) en la Tabla 5.1. Estos resultados se obtuvieron para números cuánticos del hidrógeno atómico. La columna E_1 da la contribución del término $\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}$, mientras que la columna E_2 da la contribución de la integral en la Ec. (5.177). F_j es el factor de los números cuánticos J, L, etc. Puede observarse que no hay contribuciones para estados s , y las contribuciones de E_1 son siempre mayores que aquellas de E_2 .

Consideremos ahora al hamiltoniano:

$$H = - \frac{e}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) \quad (5.186)$$

en su forma cuantizada:

$$H \psi = - \frac{e\hbar}{2mi} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla) \psi. \quad (5.187)$$

n	L	M_L	J	S	M_S	M_J	F_j	E_1	E_2	$E_1 + E_2$
1	0	0	1/2	1/2	-1/2	-1/2	0	0	0	0
1	0	0	1/2	1/2	1/2	-1/2	0	0	0	0
2	0	0	1/2	1/2	-1/2	-1/2	0	0	0	0
2	0	0	1/2	1/2	1/2	-1/2	0	0	0	0
2	1	-1	3/2	1/2	-1/2	-3/2	1	1	1/5	6/5
2	1	-1	3/2	1/2	1/2	-1/2	1	1	1/5	6/5
2	1	0	1/2	1/2	-1/2	-1/2	-1	-1	-3/5	-8/5
2	1	0	3/2	1/2	1/2	1/2	1	1	3/5	8/5
2	1	1	1/2	1/2	-1/2	1/2	-1	-1	-1/5	-6/5
2	1	1	3/2	1/2	1/2	3/2	1	1	1/5	6/5
3	0	0	1/2	1/2	-1/2	-1/2	0	0	0	0
3	0	0	1/2	1/2	1/2	-1/2	0	0	0	0
3	1	-1	3/2	1/2	-1/2	-3/2	1	1	1/5	6/5
3	1	-1	3/2	1/2	1/2	-1/2	1	1	1/5	6/5
3	1	0	1/2	1/2	-1/2	-1/2	-1	-1	-3/5	-8/5
3	1	0	3/2	1/2	1/2	1/2	1	1	3/5	8/5
3	1	1	1/2	1/2	-1/2	3/2	-1	-1	-1/5	-6/5
3	1	1	5/2	1/2	1/2	-5/2	1	1	1/5	6/5
3	2	-2	5/2	1/2	-1/2	-5/2	2	2	2/7	16/7
3	2	-2	5/2	1/2	1/2	-3/2	2	2	2/7	16/7
3	2	-1	3/2	1/2	-1/2	-3/2	-2	-2	-6/7	-20/7
3	2	-1	5/2	1/2	1/2	-1/2	2	2	6/7	20/7
3	2	0	3/2	1/2	-1/2	-1/2	-2	-2	-22/21	-64/21
3	2	0	5/2	1/2	1/2	1/2	2	2	22/21	64/21
3	2	1	3/2	1/2	-1/2	1/2	-2	-2	-6/7	-20/7
3	2	1	5/2	1/2	1/2	3/2	2	2	6/7	20/7
3	2	2	3/2	1/2	-1/2	3/2	-2	-2	-2/7	-16/7
3	2	2	5/2	1/2	1/2	5/2	2	2	2/7	16/7

Tabla 5.1: Energías E_1 , E_2 y $E_1 + E_2$ en unidades de $e\hbar/(2m)$.

Nótese que:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} r \mathbf{e}_r \cdot \nabla = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} \quad (5.188)$$

donde el vector unitario radial se define como:

$$\mathbf{e}_r = \frac{\mathbf{r}}{r}. \quad (5.189)$$

A partir de álgebra de Pauli:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} = \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}) \quad (5.190)$$

y para un campo magnético uniforme

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad (5.191)$$

en donde:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = 0 \quad (5.192)$$

se deduce que:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} = i \frac{\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r}}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}. \quad (5.193)$$

Como en la Nota 251(1) que acompaña al documento UFT 251 en el portal www.aias.us, se deduce que:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \psi &= \frac{\hbar}{r} \left(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A} \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial r} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A}) \right) \psi \\ &\quad - \frac{1}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{r} \times \mathbf{A} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \psi. \end{aligned} \quad (5.194)$$

Utilizando la Ec. (5.191) resulta:

$$\frac{\mathbf{r}}{r} \times \mathbf{A} = \frac{r}{2} (\mathbf{B} - \mathbf{e}_r (\mathbf{B} \cdot \mathbf{e}_r)) \quad (5.195)$$

y que:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \mathbf{r} \times \mathbf{A} &= \mathbf{B} - \frac{1}{2r} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 \mathbf{e}_r (\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{B})) \\ &= \mathbf{B} - \mathbf{e}_r (\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{B}) \end{aligned} \quad (5.196)$$

de manera que:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \psi = \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_1 \left(\hbar \psi + \frac{1}{2} r \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \psi \right) \quad (5.197)$$

en donde la densidad de flujo magnético modificada es:

$$\mathbf{B}_1 = \mathbf{B} - \mathbf{e}_r (\mathbf{e}_r \cdot \mathbf{B}). \quad (5.198)$$

El hamiltoniano (5.187) puede entonces desarrollarse como:

$$H \psi = -\frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_1 \left(\psi + r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{e}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_1 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \psi. \quad (5.199)$$

Recordemos que el desarrollo convencional del hamiltoniano es bien conocido:

$$\begin{aligned}
H \psi &= i \frac{e\hbar}{2m} (\nabla \cdot (\mathbf{A}\psi) + \mathbf{A} \cdot \nabla\psi) - \frac{e\hbar}{2m} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \times (\mathbf{A}\psi) + \mathbf{A} \times \nabla\psi) \\
&= - \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B} + i \frac{e\hbar}{2m} ((\nabla \cdot \mathbf{A})\psi + 2 \nabla\psi \cdot \mathbf{A})
\end{aligned} \tag{5.200}$$

y omite la información dada en la Ec. (5.199).

Como en la Nota de Acompañamiento 251(2) publicada en el portal www.aias.us, es posible definir tres tipos novedosos de hamiltoniano:

$$H_1 \psi = - \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_1 \psi \tag{5.201}$$

$$H_2 \psi = - \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_1 r \frac{\partial \psi}{r} \tag{5.202}$$

$$H_3 \psi = \frac{e\hbar}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_1 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \psi \tag{5.203}$$

cutos valores esperados de energía son:

$$E_1 = - \frac{e\hbar}{2m} \int \psi * \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_1 \psi \, d\tau \tag{5.204}$$

$$E_2 = - \frac{e\hbar}{2m} e \sim 2m \int \psi * \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_1 r \frac{\partial \psi}{\partial r} \, d\tau \tag{5.205}$$

$$E_3 = \frac{e}{2m} e 2m \int \psi * \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{B}_1 \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \psi \, d\tau \tag{5.206}$$

con la normalización de Born:

$$\int \psi * \psi \, d\tau = 1. \tag{5.207}$$

Estos se desarrollan en el documento UFT 251 para las funciones de onda hidrogénicas, dando muchos resultados novedosos, de utilidad para la química analítica. El empleo de la

conocida álgebra de Pauli de una manera nueva se ilustra en el nivel más sencillo en el documento UFT 252, con el mismo hamiltoniano de la energía cinética:

$$H \psi = \frac{1}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi \quad (5.208)$$

en donde el álgebra de Pauli es:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} = \frac{1}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}). \quad (5.209)$$

Por lo tanto:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} &= \frac{1}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L})(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}) \\ &= \frac{1}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i(\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p}) - L^2 - i \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \times \mathbf{L}), \end{aligned} \quad (5.210)$$

que puede cuantizarse utilizando:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \psi = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial \psi}{\partial r},$$

$$L^2 \psi = \hbar^2 l(l+1) \psi,$$

$$\mathbf{L} \times \mathbf{L} \psi = i \hbar \psi,$$

$$\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \psi = \frac{\hbar^2}{2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \psi.$$

Por lo tanto, hay resultados, tales como los que siguen a continuación, que son instructivos en el uso de operadores en mecánica cuántica:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \psi) = \frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} \left(\left(\frac{\hbar}{i} r \frac{\partial}{\partial r} \right) \psi \right). \quad (5.211)$$

Como se muestra en detalle en el documento UFT 252, el hamiltoniano (5.208) puede desarrollarse como:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + \frac{1}{m} \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{L}}{r} \left(2 \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\psi}{r} \right) \quad (5.212)$$

donde las funciones de onda son los armónicos esféricos.

$$\psi = Y_l^m. \quad (5.213)$$

El análisis nos da dos novedosas clases de valores esperados de energía:

$$E_1 = \frac{\hbar^2}{2m} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \int \psi^* \frac{1}{r} r \frac{\partial \psi}{\partial r} d\tau \quad (5.214)$$

y

$$E_2 = \frac{\hbar^2}{2m} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \int \psi^* \frac{1}{r^2} \psi d\tau \quad (5.215)$$

que se evalúan mediante computación en el documento UFT 252.

Análogamente, el cuadrático hamiltoniano en el potencial:

$$H_5 = \frac{e^2}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A} \psi \quad (5.216)$$

puede desarrollarse como en el documento UFT 252 utilizando la Ec. (5.191) como:

$$H_5 \psi = \frac{e^2 B z^2}{8m} r^2 (1 - \cos^2 \theta) \psi \quad (5.217)$$

nuevamente dando tipos novedosos de espectroscopía.

El hamiltoniano:

$$H_7 \psi = \frac{1}{2m} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \left(1 + \frac{e\varphi}{2mc^2} \right) \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi \quad (5.218)$$

nos da, a partir de la ecuación del fermión, el componente de la órbita de espín:

$$H_8 \psi = \frac{e}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \varphi \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \psi \quad (5.219)$$

como hemos visto, y la la Ec. (5.219) también puede desarrollarse utilizando la Ec. (5.209) para dar:

$$H_8 \psi = \frac{e}{4m^2 c^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}) \frac{\varphi}{r^2} (\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}) \psi . \quad (5.220)$$

Hay varios términos en esta ecuación que pueden desarrollarse como en el documento UFT 252. Por ejemplo:

$$H_9 \psi = \frac{e}{4m^2 c^2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \left(\frac{\varphi}{r^2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \right) \psi \quad (5.221)$$

en donde:

$$\mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \psi = -i\hbar r \frac{\partial \psi}{\partial r} . \quad (5.222)$$

De manera que el hamiltoniano da:

$$H_9 \psi = \frac{e^2 \hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2 c^2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \frac{1}{r^3} \left(3\psi - r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \quad (5.223)$$

y dos tipos de valores esperados de energía:

$$E_{91} = \frac{3e^2 \hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2 c^2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \int \frac{\psi \psi^*}{r^3} d\tau \quad (5.224)$$

y

$$E_{92} = -\frac{e^2 \hbar^2}{16\pi\epsilon_0 m^2 c^2} (j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)) \int \frac{\psi\psi^*}{r^3} d\tau \quad (5.225)$$

que dan nuevos espectros de resonancia fermiónica observables.

El principal hamiltoniano de órbita de espín (5.220) puede desarrollarse en los siguientes cuatro hamiltonianos:

$$H_{10} \psi = \frac{e}{4m^2 c^2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \left(\frac{\varphi}{r^2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \psi \right) \quad (5.226)$$

$$H_{11} \psi = \frac{ie}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \left(\frac{\varphi}{r^2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \psi \right) \quad (5.227)$$

$$H_{12} \psi = \frac{ie}{4m^2 c^2} \mathbf{r} \cdot \mathbf{p} \left(\frac{\varphi}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \psi \right) \quad (5.228)$$

$$H_{13} \psi = -\frac{e}{4m^2 c^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \left(\frac{\varphi}{r^2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L} \psi \right) \quad (5.229)$$

y estos se evalúan sistemáticamente en el documento UFT 252, dando muchos nuevos resultados. Finalmente, en esta sección puede evaluarse el efecto de la gravitación sobre la resonancia fermiónica, como en el documento UFT 253, utilizando la prescripción mínima gravitacional:

$$E \rightarrow E + m\Phi \quad (5.230)$$

donde el potencial gravitacional es:

$$\Phi = -\frac{GM}{r} \quad (5.231)$$

donde G es la constante de Newton, y donde Φ es el potencial gravitacional. Aquí, M es una masa que se ve atraída a la masa del electrón m . Se desarrollan varios efectos de la gravitación en el documento UFT 253.

5.5 Refutación de la Indeterminación: las Ecuaciones Cuánticas de Hamilton y de Fuerza.

Los métodos utilizados para deducir la ecuación del fermión pueden utilizarse como aparece en los documentos UFT 175 a UFT 177 en el portal www.aias.us, para obtener la ecuación de Schroedinger a partir de la geometría diferencial. Los axiomas fundamentales de la mecánica cuántica pueden obtenerse a partir de geometría y relatividad. Estos métodos pueden utilizarse para inferir la existencia de los equivalentes cuantizados de las ecuaciones de movimiento de Hamilton, las cuales éste obtuvo alrededor de 1833 sin el empleo de la dinámica lagrangiana. Es bien sabido que las ecuaciones de Hamilton utilizan la posición (x) y el momento (p) como variables conjugadas en un sentido clásico bien definido [1]- [10], y así se especifican simultáneamente x y p utilizando la pesada jerga de Copenhague del siglo XX. Por lo tanto, por equivalencia clásica cuántica, x y p se especifican simultáneamente en las ecuaciones cuánticas de Hamilton, refutando así la interpretación de Copenhague de la mecánica cuántica basada en el conmutador de operadores de posición y momento. Las ecuaciones cuánticas de Hamilton fueron desarrolladas por primera vez en el documento UFT 175, en 2011, y se describen en esta sección. Demuestran que x y p se especifican simultáneamente en la mecánica cuántica, una ilustración clara de la confusión provocada por la interpretación de Copenhague.

Se utiliza en esta sección el anti-conmutador $\{\hat{x}, \hat{p}\}$ para desarrollar nuevas refutaciones de Copenhague, en cuanto a que al actuar $\{\hat{x}, \hat{p}\}$ sobre funciones de onda que son soluciones exactas de la ecuación de Schroedinger, producen valores esperados iguales a cero para el oscilador armónico, y diferentes de cero para el hidrógeno atómico. Se demuestra que el anti-conmutador $\{\hat{x}, \hat{p}\}$ es proporcional al conmutador $[x^2, p^2]$, cuyos valores esperados para el oscilador armónico son todos iguales a cero, en tanto que para el hidrógeno atómico son todos distintos de cero. Para la partícula en un anillo, las combinaciones pueden ser iguales a cero, mientras que conmutadores individuales de este tipo son distintos de cero. Para movimiento lineal, se revelan inconsistencias internas en la interpretación de Copenhague, y para la partícula en una esfera el conmutador nuevamente es distinto de cero. Se han verificado los cálculos manuales en quince Notas de Acompañamiento adicionales del documento UFT 175 mediante álgebra computacional, como también ha sido el caso para todos los cálculos en la teoría UFT a la cual pueda aplicarse álgebra computacional. Se elaboraron tablas con valores esperados relevantes en el documento UFT 175. La interpretación de Copenhague se refuta completamente, porque en dicha interpretación no tiene sentido alguno que el valor esperado de un conmutador de operadores sea igual a cero y distinto de cero simultáneamente para el mismo par de operadores. Uno de los operadores sería absolutamente incognoscible, mientras que el otro sería cognoscible con precisión si el valor esperado fuese distinto de cero, y ambos serían cognoscibles con precisión si dicho valor fuese igual a cero. Estas dos interpretaciones se refieren, respectivamente, a valores esperados para un conmutador distinto de cero e igual a cero, y ambas interpretaciones no pueden ser correctas para el mismo par de operadores. Con anterioridad al trabajo realizado en el documento UFT 175 en 2011, se pensaba que los

conmutadores de un dado par de operadores serían iguales a cero o distintos de cero, nunca iguales a cero y distintos de cero al mismo tiempo, de manera que nunca se efectuó una clara refutación de Copenhague. En la teoría ECE, no se utiliza la jerga de Copenhague ni su estilo no científico y antibaconiano, y los valores esperados constituyen consecuencias directas de los operadores fundamentales introducidos por Schroedinger. Este último rechazó inmediatamente Copenhague, como también lo hicieron Einstein y de Broglie.

La ecuación de Schroedinger se obtiene en la teoría ECE a partir del postulado de la tétrada de la geometría de Cartan, que se reformula como la ecuación de onda de la teoría ECE:

$$(\square + R) q^a{}_{\nu} = 0 \quad (5.232)$$

donde:

$$R := q^{\nu}{}_{\alpha} \partial^{\mu} (\omega^{\alpha}{}_{\mu\nu} - \Gamma^{\alpha}{}_{\mu\nu}) \quad (5.233)$$

tal como se discutió previamente en este capítulo. La ecuación del fermión, en su forma de onda, constituye el límite:

$$R \rightarrow \left(\frac{mc}{\hbar} \right)^2 \quad (5.234)$$

y para la partícula libre se reduce a:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = (E - mc^2) \psi. \quad (5.235)$$

Esta ecuación se reduce a la ecuación de Schroedinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = E_{NR} \psi \quad (5.236)$$

donde:

$$E_{NR} = E - mc^2. \quad (5.237)$$

En presencia de energía potencial, la ecuación de Schroedinger deviene:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi = (E_{NR} + V) \psi. \quad (5.238)$$

en esta deducción, el axioma fundamental de la mecánica cuántica se obtiene a partir de la ecuación de onda (5.232) y de la necesidad de que el equivalente clásico del operador H sea el hamiltoniano en la dinámica clásica, o sea la suma de las energías cinética y potencial:

$$H = E_{NR} + V. \quad (5.239)$$

De manera que en la física ECE, la mecánica cuántica puede deducirse a partir de la relatividad general de una manera directa, la cual puede evaluarse contra datos experimentales en cada etapa. Por ejemplo, previamente en este capítulo el método resultó en muchas formas novedosas de espectroscopías de órbita de espín.

Las dos ecuaciones cuánticas de Hamilton se deducen respectivamente utilizando las conocidas representaciones de posición y momento de la mecánica cuántica. En la representación de posición, el axioma de Schroedinger es:

$$\hat{p}\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (\hat{p}\psi)^* = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (5.240)$$

a partir de lo cual resulta que:

$$[\hat{x}, \hat{p}] \psi = i\hbar \psi. \quad (5.241)$$

De manera que el valor esperado del conmutador es:

$$\langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle = i\hbar. \quad (5.242)$$

en la representación de posición, el valor esperado, $\langle x \rangle$, de x es x. Se deduce entonces que:

$$\frac{d}{dx} \langle \hat{x} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle = 1. \quad (5.243)$$

Nótese que esta tautología puede deducirse como sigue a partir de la ecuación:

$$\frac{d}{dx} \langle \hat{x} \rangle = \frac{d}{dx} \int \psi^* \hat{x} \psi d\tau \quad (5.244)$$

la cual puede demostrarse como sigue. En primer lugar, se utiliza el Teorema de Leibnitz para encontrar que:

$$\frac{d}{dx} \int \psi^* \hat{x} \psi d\tau = \int \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \hat{x} \psi d\tau + \int \psi^* \hat{x} d\tau. \quad (5.245)$$

En la mecánica cuántica, los operadores son hermitianos, definidos como sigue:

$$\int \psi_m^* \hat{A} \psi_n d\tau = \left(\int \psi_n^* \hat{A} \psi_m d\tau \right)^* = \int \hat{A}^* \psi_m^* \psi_n d\tau. \quad (5.246)$$

Por lo tanto, se deduce que la Ec. (5.245) es:

$$\frac{d}{dx} \langle \hat{x} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int \psi^* (\hat{p} \hat{x} - \hat{x} \hat{p}) \psi d\tau \quad (5.247)$$

que es la Ec. (5.243), Q. E. D.

La primera ecuación cuántica de Hamilton se obtiene generalizando x para todo operador hermitiano A de la mecánica cuántica:

$$\hat{x} \rightarrow \hat{A} \quad (5.248)$$

de manera que un formato para la primera ecuación cuántica de Hamilton es:

$$\frac{d}{dx} \langle \hat{A} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{A}] \rangle. \quad (5.249)$$

En el caso especial:

$$\hat{A} = \hat{H} \quad (5.250)$$

entonces:

$$\frac{d}{dx} \langle \hat{H} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{p}, \hat{H}] \rangle . \quad (5.251)$$

Sin embargo, se sabe que:

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle . \quad (5.252)$$

De manera que, a partir de las Ecs. (5.251) y (5.252), la ecuación cuántica de Hamilton es:

$$\frac{d}{dx} \langle \hat{H} \rangle = -\frac{d}{dt} \langle \hat{p} \rangle . \quad (5.253)$$

Los valores esperados en esta ecuación son:

$$H = \langle \hat{H} \rangle \quad , \quad p = \langle \hat{p} \rangle \quad (5.254)$$

de manera que resulta la primera ecuación del movimiento de Hamilton de 1833, Q. E. D.:

$$\frac{dH}{dx} = -\frac{dp}{dt} . \quad (5.255)$$

La segunda ecuación cuántica de Hamilton se obtiene a partir de la representación del momento:

$$\hat{x}\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial p} \quad , \quad \hat{p}\psi = p\psi \quad (5.256)$$

a partir de lo cual se obtiene la siguiente tautología:

$$\frac{d}{dp} \langle \hat{p} \rangle = -\frac{\hbar}{i} \langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle . = 1. \quad (5.257)$$

Esta tautología puede obtenerse a partir de la ecuación:

$$\frac{d}{dp} \langle \hat{p} \rangle = \frac{d}{dp} \int \psi^* \hat{p} \psi d\tau. \quad (5.258)$$

Ahora generalizamos p para cualquier operador A :

$$\hat{p} \rightarrow \hat{A} \quad (5.259)$$

y la segunda ecuación cuántica de Hamilton en un formato es:

$$\frac{d}{dp} \langle \hat{A} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{A}] \rangle. \quad (5.260)$$

En el caso especial:

$$\hat{A} = \hat{H} \quad (5.261)$$

la segunda ecuación cuántica de Hamilton es:

$$\frac{d}{dp} \langle \hat{H} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle. \quad (5.262)$$

Sin embargo, se sabe que:

$$\langle [\hat{x}, \hat{H}] \rangle = -\frac{\hbar}{i} \frac{d\langle \hat{x} \rangle}{dt} \quad (5.263)$$

de manera que la segunda ecuación cuántica de Hamilton es:

$$\frac{d}{dp} \langle \hat{H} \rangle = \frac{d}{dt} \langle \hat{x} \rangle \quad (5.264)$$

la cual se reduce a su contraparte clásica, la segunda ecuación cuántica de Hamilton de la dinámica clásica, Q. E. D.:

$$\frac{dH}{dp} = \frac{dx}{dt} . \quad (5.265)$$

nótese cuidadosamente que ambas ecuaciones cuánticas de Hamilton se obtienen directamente a partir del conocido conmutador (5.242) de la mecánica cuántica. Inversamente, las ecuaciones de Hamilton de 1833 implican al conmutador (5.242) sólo a partir del postulado de Schroedinger, en representación de posición y momento respectivamente. En las ecuaciones de Hamilton de la dinámica clásica, x y p son observables simultáneamente, de manera que también son observables simultáneamente en las ecuaciones cuantizadas de movimiento de Hamilton y en la mecánica cuántica en general. Este argumento refuta directamente Copenhague, y la afirmación arbitraria de que x y p no son observables simultáneamente.

El método del anti-conmutador para refutar Copenhague se desarrolló también en el documento UFT 175, publicado en el portal www.aias.us , y se basa en la definición del anti-conmutador:

$$\{\hat{x}, \hat{p}\} \psi = (\hat{x} \hat{p} + \hat{p} \hat{x}) \psi. \quad (5.266)$$

En la representación de posición, el anti-conmutador es:

$$\{\hat{x}, \hat{p}\} \psi = -i\hbar \left(x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial p} (x\psi) \right) = -i\hbar \left(\psi + 2x \frac{\partial \psi}{\partial x} \right) . \quad (5.267)$$

Análogamente, el conmutador de \hat{p}^2 y \hat{x}^2 se define como:

$$[\hat{x}^2, \hat{p}^2] \psi = ([\hat{x}^2, \hat{p}] \hat{p} + \hat{p} ([\hat{x}^2, \hat{p}])) \psi. \quad (5.268)$$

Utilizamos ahora las ecuaciones cuánticas de Hamilton para encontrar que:

$$[\hat{p}, \hat{x}^2] \psi = -2i\hbar x \psi, \quad (5.269)$$

$$[\hat{x}^2, \hat{p}] \psi = 2i\hbar x \psi. \quad (5.270)$$

Se deduce entonces que:

$$[\hat{x}^2, \hat{p}^2] \psi = 2i\hbar(\hat{p}\hat{x} + \hat{x}\hat{p})\psi. \quad (5.271)$$

de manera que la siguiente ecuación de gran utilidad se ha demostrado en una dimensión:

$$[\hat{x}^2, \hat{p}^2] \psi = 2i\hbar \{\hat{x}, \hat{p}\} \psi. \quad (5.272)$$

En tres dimensiones, el axioma de Schroedinger en representación de posición es:

$$\hat{p}\psi = -i\hbar\nabla\psi \quad (5.273)$$

y en tres dimensiones el conmutador relevante es:

$$[\mathbf{r}, \mathbf{p}] \psi = -i\hbar (\mathbf{r} \cdot \nabla\psi - \nabla \cdot (\mathbf{r}\psi)) \quad (5.274)$$

donde, en coordenadas cartesianas:

$$r^2 = X^2 + Y^2 + Z^2. \quad (5.275)$$

Por lo tanto:

$$[\mathbf{r}, \mathbf{p}] \psi = -i\hbar (\mathbf{r} \cdot \nabla\psi - \psi \nabla \cdot \mathbf{r} - \mathbf{r} \cdot \nabla\psi) \quad (5.276)$$

donde:

$$\nabla \cdot (\mathbf{r}\psi) = \psi \nabla \cdot \mathbf{r} + \mathbf{r} \cdot \nabla\psi \quad (5.277)$$

en donde:

$$\nabla \cdot \mathbf{r} = 3. \quad (5.278)$$

De manera que:

$$[\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}] \psi = 3i\hbar\psi. \quad (5.279)$$

En tres dimensiones:

$$[\hat{r}^2, \hat{p}^2] \psi = [\hat{r}^2, \hat{\mathbf{p}}] \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot ([\hat{r}^2, \hat{\mathbf{p}}]) \psi \quad (5.280)$$

donde:

$$[\hat{r}^2, \hat{p}^2] \psi = r^2 \hat{\mathbf{p}} \psi - \hat{\mathbf{p}} (r^2 \psi) = i \hbar \nabla r^2 \psi \quad (5.281)$$

y donde:

$$\nabla r^2 = \frac{\partial r^2}{\partial X} \mathbf{i} + \frac{\partial r^2}{\partial Y} \mathbf{j} + \frac{\partial r^2}{\partial Z} \mathbf{k} \quad (5.282)$$

con:

$$r^2 = X^2 + Y^2 + Z^2. \quad (5.283)$$

De manera que:

$$\nabla r^2 = 2\mathbf{r} \quad (5.284)$$

y el equivalente tridimensional de la Ec. (5.272) es:

$$[\hat{r}^2, \hat{p}^2] \psi = 2i\hbar \{\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}\} \psi. \quad (5.285)$$

El anti-conmutador en esta ecuación es:

$$(\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{r}}) \psi = \hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} \psi + \hat{\mathbf{p}} \cdot (\hat{\mathbf{r}} \psi) = -i\hbar (2\mathbf{r} \cdot \nabla \psi + 3\psi) \quad (5.286)$$

donde:

$$\mathbf{r} \cdot \nabla \psi = X \frac{\partial \psi}{\partial X} + Y \frac{\partial \psi}{\partial Y} + Z \frac{\partial \psi}{\partial Z} \quad (5.287)$$

de manera que, en coordenadas cartesianas:

$$\{\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}\} \psi = -i\hbar \left(2 \left(X \frac{\partial \psi}{\partial X} + Y \frac{\partial \psi}{\partial Y} + Z \frac{\partial \psi}{\partial Z} \right) + 3\psi \right). \quad (5.288)$$

Cuando se considera el átomo de hidrógeno, el anti-conmutador relevante es:

$$\{\hat{r}, \hat{p}_r\} \psi = -i\hbar \left\{ r, \frac{\partial}{\partial r} \right\} \psi. \quad (5.289)$$

Con estas definiciones, algunos valores esperados:

$$\langle [\hat{r}^2, \hat{p}^2] \rangle = 2i\hbar \langle \{\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{p}}\} \rangle \quad (5.290)$$

se calculan para soluciones exactas de la ecuación de Schroedinger en las 15 notas de cálculo que acompañan el documento UFT 175 en el portal www.aias.us. Todos los valores esperados se verificaron por álgebra computacional y se tabularon. El resultado constituye una refutación definitiva de Copenhague porque los valores esperados pueden ser iguales a cero o distintos de cero, dependiendo de qué solución de la ecuación de Schroedinger se utiliza, como ya se ha mencionado. De manera que este método reduce Copenhague a un absurdo, Q. E. D., una refutación por *reductio ad absurdum* de la interpretación de Copenhague de la mecánica cuántica.

Como ejemplo, mostramos varios conmutadores y anti-conmutadores para las funciones de onda del hidrógeno atómico en la Tabla 5.2. Por ejemplo, r^2 conmuta con p_r^2 pero r no conmuta con p . Esto significa, según la interpretación de Copenhague, que r^2 y p_r^2 se conocen al mismo tiempo, pero no así r y p_r , un *reductio ad absurdum*.

La ecuación de fuerza de la mecánica cuántica fue inferida por primera ocasión en el año 2011, en los documentos UFT 176 y UFT 177, publicados en el portal www.aias.us, y ha sido muy influyente. Se redujo a partir de dos ecuaciones cuánticas de Hamilton:

$$i\hbar \frac{d}{dq} \langle \hat{H} \rangle = \langle [\hat{H}, \hat{p}] \rangle \quad (5.291)$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (5.296)$$

entonces

$$\frac{dH}{dx} = \frac{dV}{dx} \quad (5.297)$$

porque en la dinámica de Hamilton x y p son variables canónicas independientes. Por lo tanto, La Ec. (5.293) se satisface automáticamente. Utilizando el resultado:

$$[\hat{H}, \hat{p}]\psi = i\hbar \frac{dV}{dx} \psi = -i\hbar F \psi \quad (5.298)$$

donde F es fuerza, la Ec. (5.291) da la ecuación de fuerza de la mecánica cuántica:

$$-\frac{d\hat{H}}{dx} \psi = F \psi \quad (5.299)$$

donde el *eigen* operador se define como:

$$\frac{d\hat{H}}{dx} := -\hbar^2 \frac{\partial^3}{\partial x^3} + \frac{dV(x)}{dx}. \quad (5.300)$$

En el límite clásico, el principio correspondiente de mecánica cuántica significa que la Ec. (5.299) deviene una de las ecuaciones de Hamilton:

$$F = \frac{dp}{dt} = -\frac{dH}{dx}. \quad (5.301)$$

En la representación del momento, la Ec. (5.295) da una segunda ecuación fundamental de la mecánica cuántica:

$$\frac{d\hat{H}}{dp} \psi = v \psi \quad (5.302)$$

donde los *eigen* valores son aquellos de la velocidad cuantizada. Aquí:

$$\frac{dH}{dp} = pm \quad (5.303)$$

y:

$$\frac{d\hat{H}}{dp} \psi = v\psi \quad (5.304)$$

la Ec. (5.302) corresponde en el límite clásico a la segunda ecuación de Hamilton:

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{dH}{dp} \quad (5.305)$$

la formulación general, o canónica, de las Ecs. (5.299) y (5.302) es como sigue:

$$-\frac{d\hat{H}}{dp} \psi = F \psi \quad (5.306)$$

y

$$\frac{d\hat{H}}{dp} \psi = v\psi \quad (5.307)$$

que se reducen a las ecuaciones canónicas de Hamilton:

$$-\frac{dH}{dq} = \frac{dp}{dt} \quad (5.308)$$

y

$$\frac{dH}{dp} = \frac{dq}{dt} \quad (5.309)$$

El equivalente rotacional de la Ec. (5.310) es:

$$i\hbar \frac{d\hat{H}}{d\varphi} \psi = [\hat{H}, \hat{J}_Z] \psi \quad (5.310)$$

en donde las variables canónicas son:

$$q = \varphi, \quad p = \hat{J}_Z. \quad (5.311)$$

para problemas rotacionales en la mecánica cuántica de átomos y moléculas, H conmuta con \hat{J}_Z de manera que

$$[\hat{H}, \hat{J}_Z] = 0 \quad (5.312)$$

en cuyo caso:

$$\frac{d\hat{H}}{d\varphi} \psi = 0. \quad (5.313)$$

Para que $d\hat{H}/d\varphi$ sea distinto de cero debe existir una energía potencial dependiente de φ en el hamiltoniano:

$$H = \frac{J^2}{2I} + V(\varphi) \quad (5.314)$$

de manera que el operador hamiltoniano debe ser

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2I} \hat{\Lambda}^2 + V(\varphi) \quad (5.315)$$

donde $\hat{\Lambda}$ es el operador lagrangiano. En este caso:

$$\frac{d\hat{H}}{d\varphi} = -\frac{\hbar^2}{2I} \hat{\Lambda}^2 + \frac{dV}{d\varphi} \quad (5.316)$$

y la Ec. (5.310) da la ecuación del torque de la mecánica cuántica:

$$-\frac{d\hat{H}}{d\varphi} \psi = T_q \psi = -\frac{dV}{d\varphi} \psi \quad (5.317)$$

donde T_q son *eigen* valores de torque.

También existe ecuaciones cuánticas de Hamilton de orden mayor, tal como se comenta en el documento UFT 176, así como ecuaciones cuánticas de Hamilton para rotación en un plano.

Finalmente, tal como se mostró en detalle en el influyente documento UFT 177, publicado en el portal www.aias.us, la ecuación de fuerza de la mecánica cuántica puede reducirse a partir de las ecuaciones cuánticas de Hamilton, y es:

$$(\hat{H} - E) \frac{d\psi}{dx} = F \psi \quad (5.318)$$

donde la fuerza se define como:

$$\frac{d}{dx} \langle \hat{H} \rangle = \frac{dH}{dx} = \frac{dV}{dx} = -F = -\frac{dp}{dt} . \quad (5.319)$$

En la ecuación de fuerza, el operador hamiltoniano actúa sobre la derivada de la función de onda de Schroedinger, o en general sobre la derivada de una función de onda de la mecánica cuántica obtenida de cualquier manera, por ejemplo, en química cuántica computacional, y esto constituye un nuevo método de utilidad general tal como se desarrolló en el documento UFT 175.

Como ejemplos, mostramos el componente de la fuerza cuántica radial para algunos orbitales de hidrógeno (Figs. 4.1 - 4.3). Hay polos en la fuerza, pero sólo en valores radiales donde las funciones de onda son iguales a cero. Esto inhibe la divergencia para los valores esperados de fuerza. En algunos casos, la fuerza cruza el valor cero donde la función de onda posee un

máximo o un mínimo. Esto podría significar que la carga se desplaza a lugares con alta densidad de probabilidad. Para moléculas, esto podría tener que ver con el hecho que el mismo tipo de orbitales pueden ser de unión o anti-unión, dependiendo de la simetría. Los eigen valores de la fuerza tienen el potencial para dar nuevos detalles en los mecanismos de unión química y de estabilidad. Hay más ejemplos en los documentos UFT 177 y UFT 178.

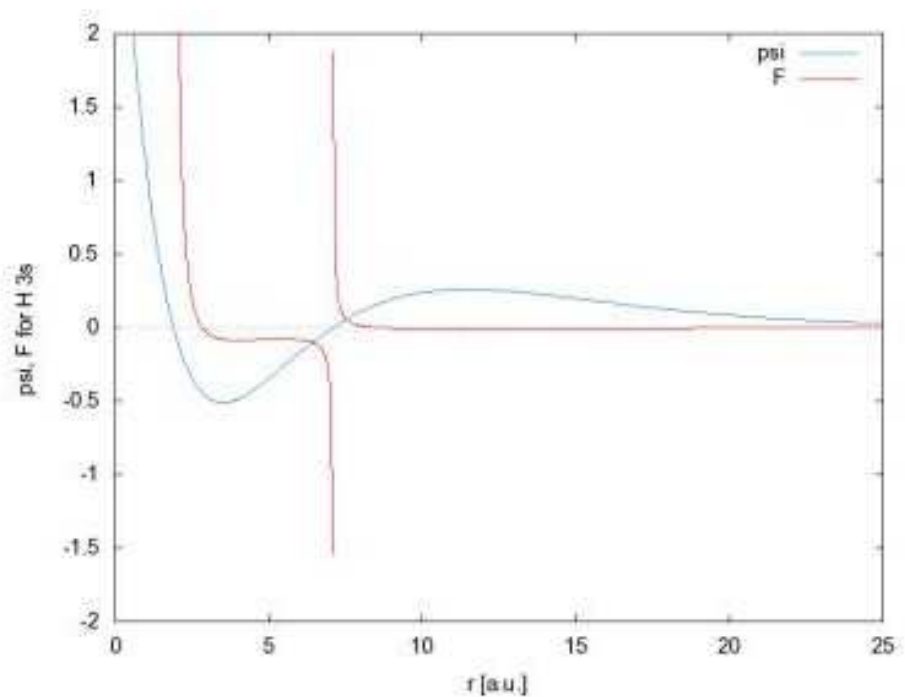


Figura 5.1: Función de onda radial y fuerza cuántica para el orbital 3s del átomo de hidrógeno.

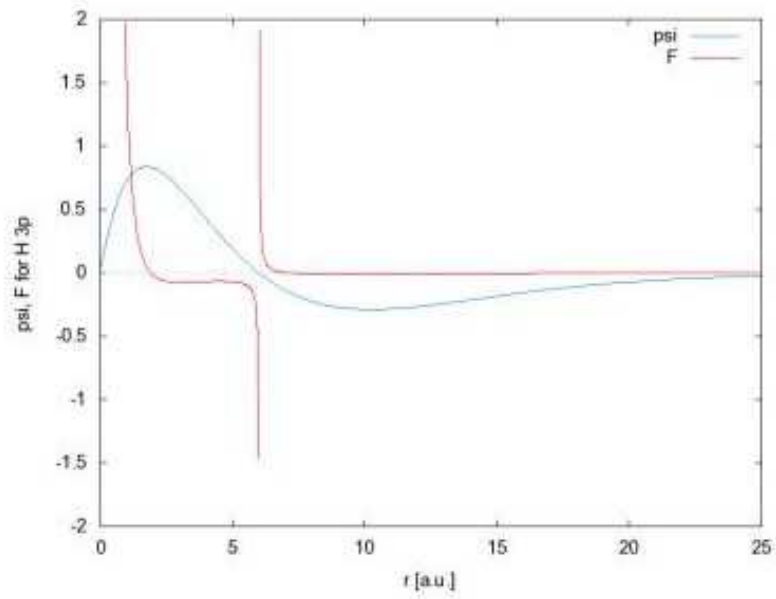


Figura 5.2: Función de onda radial y fuerza cuántica para el orbital 3p del átomo de hidrógeno.

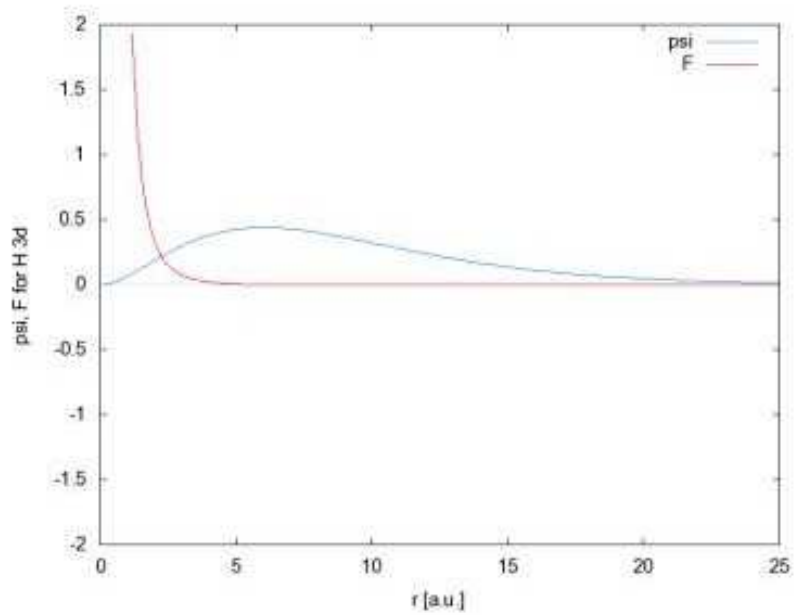


Figura 5.3: Función de onda radial y fuerza cuántica para el orbital 3d del átomo de hidrógeno.