

# 波元素物质结构理论及其应用评述

涂润生

(黄冈师范学院, 黄冈市 438000)

**【摘要】**量子场论将粒子都看作是场,无法非常具体地描述电子的组成、结构和内禀运动状态。探索电子的组成、结构和内禀运动状态并不与量子场论冲突。通过一个“电子的组成、结构和内禀运动方式”的假设(光结电子结构模型),而大大美化了量子力学——量子力学的重要方程和算符(特别是有关电子自旋的算符)都可以根据这个假设推导出来。能为电子自旋、原子结构给出合理而无矛盾的经典转动模型。原子的经典行星模型还可以成功地应用于氢分子、锂分子、钠分子的离解能和键长的计算。对于原子和分子的计算既可以分别使用又可以混合使用波动力学方法和行星模型语境下的经典方法。成功的应用事例多达数百个。电子结构模型的成功的应用和对量子力学的美化作用显然又成了该模型的证据。“玻尔行星模型方法和现代量子力学方法可广泛地混合使用”表明这两种方法是等价的或相互兼容的。可促使人类重新认识微观体系的特点。

**关键词:**光结电子结构模型,电子的组成、结构和内禀运动状态,量子力学,电子自旋磁矩算符,应用研究。

**现有的**物质结构理论和量子场论都无法描述基本粒子的具体来源(量子场论中,粒子的产生都是场的瞬时转化,而不是真正的粒子创生)。有必要探索基本粒子或场的下一个层次的组成(或来源)。“所有基本粒子都主要来源于光子”的物质结构理论在逻辑与事实的结合上有很大的优势。利用这种新的物质结构理论,可以混合使用量子理论、玻尔量子论和经典电磁学理论来描述同一个粒子。这种新的物质结构理论及其应用实例同时说明了,在基本粒子自旋角动量、原子电离能、分子的离解能的计算方面,不再存在微观世界与宏观世界之间的鸿沟。

**关键词:**波元素物质结构理论,光结电子结构模型,电子自旋磁矩算符,量子力学,量子力学与经典电磁学的兼容。

## 1. 物质结构理论现状及研究进展

对于现有量子力学及对应的物质结构(特别是基本粒子结构)理论,有人非常满意,有人很不满意。例如,很多人对量子力学解释体系很不满意【1-3】。因为,那是违反定域实在论和决定论的。而这种解释体系又对量子力学的数学形式体系及其应用有很大的影响。在化学中,量子力学的定量应用结果就不是很准确的。然而,保守的人觉得量子化学的定量计算是准确和成功的。激进的人认为,所谓的量子化学计算的“准确和成功”是通过不断与实验结果对照而得到半经验的计算程序而得到的。利用量子力学准确地手算一个很简单的氢分子就办不到,还得借助计算机程序。然而,计算氢分子的计算机程序不是全凭逻辑编写的,而主要是根据经验及不断与已知的实验值对照、修改而编写的。如果没知道实验值,那是无法编程计算的。电子自旋角动量和自旋磁矩的量子力学计算结果与实验事实相符。对于这一事实,满意的人认为,这是严格计算出来的,表明了量子力学是成功的和实用的。不满意的人认为,我们不知道电子自旋和轨道运动的具体方式,却计算出与自旋运动或轨道运动有关的物理量的值。这在形式逻辑上是说不通的。它让人感觉计算结果是拼凑而成的,是投机取巧的结果,或者感觉似乎有神助。难免使感觉量子力学计算理论是无本之木,无根基的高楼。就算是对于最简单的分子——氢分子的计算,情况也是一样的:不知道氢分子的具体结构和核外的电子具体运动状态和运动方式,却计算出了氢分子的能量本征值(和其他与氢分子的结构和其中的电子的运动方式有关的物理量的值)。这也很难不让人产生上面提到的那些不好的感觉。电子的内部结构是怎样的?核外电子是什么运动的?电子自旋的方式是什么?这些都不能通过与量子力学及与量子力学有关的理论或物质结构理论弄明白(不知道电子自旋磁矩是什么来的)。物理

学家不知道粒子的具体运动方式和完整的内部结构，却计算出了粒子的一些与结构和运动有关的物理量的值。在物理学中，存在想知道而无法知道的事情就是物理学理论的不足的表现。这就是物理学上空有乌云，怎么能容忍它的存在而轻易地产生满足感呢？“对现有的物理理论非常满意”怎么看都像是人们的要求太低了。当我们不知道某人是如何从北京达到广州的（只知道他花了5天时间），就无法计算他这次旅行支出的交通费或总费用。这才是正常的，符合形式逻辑的。相反，“你将他这次旅行的所有费用计算得非常准确”却是不符合形式逻辑的。没有充足的理由认为量子力学计算是个例外。在上个世纪，试探函数这个词在量子化学中几乎流行了70年。这是因为不知道分中了的电子是怎样运动及产生相互作用的，从而试探性建立电子之间及电子与核之间的相互作用势能函数。在量子力学里，所谓试探就是试着猜测、估计或者预测原始方程（因为情况太复杂或理论上有所缺失，而不知道原始方程）。这就是半经验方法。不得不使用试探函数（半经验方法）正是量子力学上空有乌云导致的。建立试探函数应该是不得已或无奈而为之，将它当作正常的操作就晃正常了。

本文作者属于对现有物理学理论不满意的一类人。因此，长期探索电子的组成和结构，内禀运动方式（特别是电子自旋的具体方式）和核外电子的运动方式。有不少人同样做过或正做这种探索工作。我了解的情况是，绝大多数人没有挣脱点粒子结构（包括小球物质结构）的思想观念的束缚。因此，都没有成功。我想尝试建立新的物质结构思想观念，以便驱散物理学上空的乌云。

经过了长期努力，我提出了波元素粒子结构假设（以前叫做光结电子结构模型。这挣脱了旧的物理结构观念的束缚）。这种粒子结构理论至少可以说清楚电子自旋的具体方式和核外电子的运动方式，并可能电子自旋解动量和自旋磁矩作准确的定量计算。波元素粒子结构模型融入量子力学数学形式体系之中，使现有的量子力学进入了定域实在论的范畴。定域实在论量子力学也确实被建立起来了【4】。可喜的是，波元素粒子结构理论和定域实在论量子力学方法的初步应用还是比较成功的。不管怎么样，本文介绍的研究工作都属于理论迭代创造性工作。在物理学领域，已经有上百年时间没有这种类型的研究工作。本文介绍的研究工作至少是值得交流和讨论的。

原则上参考文献中已经介绍的不再重复介绍。不过，随着时间的推移，作者的认识水平有所提高。发现了以前的描述有存在一些问题，必须更正（主要是以前在一些方面描述得不够详细，第统性和条理性较差）。例如，以前将描述自由电子和描述德布罗意波的情况混合在一起，出现了一些混乱。这次作者将这两种情况分开了。在论论这些工作的同时，提高了对物理学现状和发展新的认识水平。作者提出了电子自旋的具体方式和过程，并根据它计算电子的一些物理量的值。这显然消除了现有量子力学的不知道电子内禀运动的具体形式和核个电子的运动方式，却计算出了电子的一些与运动有关的物理量的值导致的投机之嫌。根据基本前导出电子自旋解动量算符和狄拉克方程、薛定谔方程（即建立与现有的量子力学体系兼容的新的量子力学理论体系），建立量子力学新方法，并开展量子力学计算。表明作者的工作可以溶入现在的量子力学体系之中，并完善量子力学理论体系。

总之，本文旨在告诉大家，作者做了什么？怎么做的？结果怎么样？并引导大家理解这作者所做研究工作的意义。

## 2. 波元素电子结构理论的基本前提

从事粒子物理学研究的学者都知道，高能光子能衰变成电子反电子偶。怎么解释这一过程？量子场论的说法是“光场发生类似于跳跃的过程从而使光场变成了电子的静电场”。由于跳跃过程是未知的，因此，量子场论还是没有说清楚光子是如何变成电子的，也没有阐明电子的内部结构，没有驱散物理学上空的乌云。到了今天，不少人相信复杂的才是正确的。但是，“正确的諸简单的”叫做简洁美观。我们不能排除这种可能。如果用最为简洁的情况描述光子衰变成电子的过程，那就是沿直线传播的光子改为沿很小的圆周传播，离散的波就可以变成看起来是粒子的东西。这种结构就像运转中的忽略了辐条的摩天轮（不过，本文说的模型不是具有静止质量的物体在转运，而是波动能量在旋转，或者说与波动能量相当的质量在旋转）。一个高能光子可以衰变成两个粒子是事实。因此，不妨假设一个高能光子先是分解成左旋圆偏振光子和右旋圆偏振光了，然后左右旋圆偏振光子各自首尾相接而沿小圆周传播而形成电子和反电子。为了方

便，我们称之为基本假设 1。通俗地说，这是光打结假设。也是光结电子结构模型。不难发现，这样的自由电子是互环状的，为了方便可以将这种环叫做电子环。两平面偏振光子合成的复合圆偏振光可再分解为两平面偏振光。基本圆偏振光是再也不能分解的非合成圆偏振光。我们在此建立一个新概念——“质线”。它就是长型物体的横切柱的质心的连线。将长型物体横切成无穷段，每段都有一个质心。再将这些质心按顺序连接成光滑曲线。这种线段就是该物体的质线。尽管上面所说的摩天轮式电子结构是三维的，但是，忽略了条辐的摩天轮的质线就是一个二维的圆。在这种情况下，电子的自旋就类似于摩天轮的质线的旋转，可以利用 SU(2)群描述它。

基本假设 2: 基本圆偏振光子围成的电子环在中心力场中可以以量子化的形式扩大半径(包括跃迁过程)，规律为  $r_d = 274n^2r_0, (n=1,2,3, \dots)$ 。

当  $Z=1$  (电子感爱到的核电荷数为 1) 时， $r_0 = \lambda/2\pi = \hbar/2mc$ 。停停含下标  $d$  的物理量是德布罗意波描述的波粒二象性粒子的物理量。如果束缚态粒子恰好是电子，则  $r_0$  就是  $r_e$ ， $m_d$  就是  $m_e$ 。当指明了被描述的粒子是电子时， $m_e$  中的脚标可以省略。就是说，势场中的电子相当于摩天轮落入了势场中，从而改变了运动方式和能量。在本文的基本假设的前提下，自由电子的质线就是组成电子的波的相轨线。

光结电子结构模型表明了，光子（即电磁波）是基本粒子下一个层次的组成或来源之一。秉承无静止质量实体比有静止质量实体更基本的原则，我们再根据实验事实假设中微子也是基本粒子的组成之一。这样，基本粒子的组成或下一个层次的来源就是光子和中微子。对应的物质结构理论也就是波元素物质结构理论。

### 3. 利用光结电子结构模型解决电子自旋磁矩的来源问题

现有的量子力学和量子场论都无法解决电子自旋磁矩的来源问题【5】。根据光基本假设 1（光结电子结构模型）可知，基本圆偏振光的光子的能量，动量和按振幅最大值都只有分解前的平面偏振光光子的一半。但二者的波长是相等的。圆偏振光子的波动方式在形式上与平面偏振光子的波动方程相同，也是 (1) 式。但是，在思考和应用时，这两种情况还是应该区别对待的。在利用 (1) 式描述自由电子等波色子时，必须使用  $[E = \hbar\nu/2, p = mc = \hbar\nu/(2c), c = \lambda\nu, \lambda = \hbar/2p = \hbar/(2mc), A, \psi(x,t)]$  这组数据(其中， $A = A_d/2$ )（第一组数据）。当利用 (1) 式描述受中心力场束缚的粒子时，选择适用于德布罗意波形式的 (1) 式。同时限定使用  $[E_d = \hbar\nu, p_d = m_d v, \lambda_d = \hbar/p_d = \hbar/(m_d v) = 2\pi r_d, A_d, \psi_d(x,t)]$  这组数据（第二组数据），且添加一个脚标  $d$  指明这一点。还有第三种方情况，那就是使用与平面偏振光（线偏振光）的波动方程对应的 (1) 式。本文没有应用这种情况，就不多谈了。当然，在描述非束缚态电子或与自由电子类似的波色子时，就不要脚标了。在第一组数据中， $m$  电子质量。在第二组数据中， $m_d$  是德布罗意波（波-粒二象性粒子）的质量。

$$\psi(x,t) = A e^{-i2\pi(\nu t - x/\lambda)}. \quad (1)$$

(1)式与  $\psi(x,t) = A e^{-i(2Et - xp)/\hbar}$  是等价的，电磁波波动方程的平面波解与它类似。(1) 式（包括该式）以及基本假设 1 告诉了大家，电子自旋的具体形式。

根据假设 (1) 可知，一个基本圆偏振光子沿一个半径为  $r$  的小圆首尾相接地传播时，有  $\lambda = 2\pi r$  的关系。自由电子的自旋角动量就是电子的内禀运动的线性角动量

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}. \quad (2)$$

将  $\lambda = 2\pi r$ ,  $p = mc$ ,  $\hbar = h/2\pi$  代入上式得

$$|\vec{L}| = \hbar/2. \quad (3)$$

在圆平面水平的情况下，如果将基本圆偏振光子顺时针传播定义为负，而逆时针传播定义为正，则将圆翻转  $180^\circ$ ，就两个方向或两个取值： $L = +\hbar/2$  和  $L = -\hbar/2$ 。可合并写为  $L = \pm\hbar/2$ 。根据经典电动力学可知，电子自旋角动量取负值，电子自旋磁矩与电子自旋角角动量的关系为

$$\mu = -\frac{e}{2mc} L = \frac{e}{4mc} \hbar. \quad (4)$$

这阐明了电子自旋磁矩的来源。即阐明了电子自旋运动（也是它的内禀运动和结构）的具体方式。下面我们根据基本假设 1 导出电子自旋角动量算符和电子自旋磁矩算符。

将 (1) 式对  $x$  求 1 阶导数，并使用描述自由电子或波色子那组数据，得

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi(x,t) = p\psi(x,t). \quad (5)$$

电子自旋角动量算符为

$$\hat{p} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}. \quad (6)$$

将(4)  $\vec{L}$  取为负， $\mu = -\frac{e}{2mc}L = -\frac{e}{4mc}\hbar$  并取前面的部分  $\mu = -\frac{e}{2mc}L$  将 (2) 式的非向量形式代入其中，考虑到  $r = \lambda/2\pi = (h/2mc)/2\pi = \hbar/2mc$ ，得

$$\mu = -\frac{e\hbar}{4mc}p. \quad (7)$$

将 (7) 式中的  $p$  更换成 (6) 式中的动量算符，得

$$\hat{\mu} = -i\frac{e\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{\partial}{\partial x}. \quad (8)$$

自由电子内禀运动（自旋运动）角动量算符，可以将 (8) 式两边同除以  $(-\frac{e}{2mc})$  得到

$$\hat{L} = i\frac{\hbar^2}{2mc}\frac{\partial}{\partial x}. \quad (9)$$

(9) 式也可以通过将 (2) 式的  $r$  换成  $\hbar/2mc$ ，同时将 (2) 式的  $p$  换成 (6) 式而得到。

对于描述束缚态粒子或德布罗意波，我们选择  $E_d = \hbar\nu_d$ ,  $p_d = m_d\nu$ ,  $\lambda_d = \hbar/p_d = \hbar/(m_d\nu) = 2\pi r_d$ ,  $A_d$ ,  $\psi_d(x,t)$  这组数据，以及

$$\psi_d(x,t) = A_d e^{-i(E_d t - x p_d)/\hbar}. \quad (10)$$

求(10) 式对  $x$  的一阶导数，得

$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial x}\psi_d(x,t) = p_d\frac{\partial}{\partial x}\psi_d(x,t). \quad (11)$$

$$\hat{p}_d = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}. \quad (12)$$

束缚态圆周运动的电子的轨道运动角动量为

$$\vec{L}_d = \vec{r}_d \times \vec{p}_d, \quad L_d = \left(\frac{\hbar}{m_d\nu}\right)p_d = \hbar. \quad (13)$$

将  $\lambda_d = 2\pi r_d$ ,  $p_d = m_d\nu$ ,  $\hbar = h/2\pi$  代入 (13) 式第一个方程，并采用它的非向量形式而得到第二个方程。只要将电子环翻转一下， $L_d$  就改变符号。将 (13) 式中的  $p_d$  更换为 (12) 式表达的动量算符可以得到 (14) 式。

$$\hat{L}_d = -i\frac{\hbar^2}{m_d\nu}\frac{\partial}{\partial x}. \quad (14)$$

(14) 式可以选择为正值。这种情况与 (3) 式类似。将 (14) 式代入 (7) 式 [即，将(7)式中的  $p_d$  更换为 (14) 式中有算符形式]，可得

$$\hat{\mu}_d = -i\frac{e\hbar^2}{2m_d^2\nu c}\frac{\partial}{\partial x}. \quad (15)$$

(15)式作用于(10) 式可得  $\mu_d = -i\frac{e\hbar^2}{4m_d^2\nu c}\frac{-i}{\hbar}m_d\nu = -\frac{e\hbar}{4m_dc}$ 。我们以基态氢原子为例。根据基本假设 1 和 2 可知，在氢原子中，束缚态电子的运动就是电子的轨道运动，束缚态电子的速度为  $\nu = ac$ 。 $L_d$  和  $\mu_d$  分别是电子

作轨道运动的解动量和轨道运动磁矩。这样，电子自旋运动的磁旋比和轨道运动的磁旋比分别为

$$\mu/L = -\frac{e\hbar}{4mc} \div \frac{\hbar}{2} = -\frac{e}{2mc}. \quad (16)$$

和

$$\mu_d/L_d = -\frac{e\hbar}{mc} \div \hbar = -\frac{e}{mc}. \quad (17)$$

对于描述电子， $m_d$  和  $m_e$  都是电子质量。我在上面两个式子中都写成了  $m$ 。比较 (16) 式和 (17) 式可知，对于基态氢原子来说，电子作轨道运动的磁旋比是电子内禀运动的磁旋比的 2 倍。

当微粒是复合粒子时，粒子做圆周运动的轨道半径不是一个德布罗意波的“波子”围成的圆的半径。即在这种情况下， $\lambda_d=2\pi$  中的  $r_d$  不是轨道半径  $R$ 。

#### 4. 根据基本假设 1 和 2（电子结构模型和氢原子模型）建立薛定谔方程

这种过程在参考文献 1-4 中有介绍。不过，为了说明那些工作的有效性，我们先导出狄拉克方程，然后通过简化而得到薛定谔方程。这是一种的推导方式。另外，本文导出的狄拉克方程与现有教科书中的某些部分不同。到底谁弄错了，留给读者评说。本节主旨在于告诉大家狄拉克方程与薛定谔方程的逻辑联系。(12) 式是束缚态电子的动量算符。二阶偏导数形式的动量算符为

$$\hat{p}_d^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (18)$$

在电动力学平衡系统中，维里定理成立，粒子的动能和质量之间有明确的关系。对于氢原子，这种关系是

$$T = p_d^2 / 2m_d. \quad (19)$$

将 (19) 式中的  $p_d^2$  换成算符形式，得

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m_d} \frac{\partial^2}{\partial x^2}. \quad (20)$$

$T+V=H$  是电动力学平衡系统中粒子的动能和势能之和，而不包含与静态质量对应的能量。在上面等式的两边加上  $V$ 。然后根据算符的定义( $V$  的算符就是  $V$  本身)，我们可以得到

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_d} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V. \quad (21)$$

(21) 式是哈密顿算符。它作用于波函数，得到能量本征值  $H$ (哈密顿量)。

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m_d} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V \right] \psi = \hat{H}\psi_d. \quad (22)$$

(22) 式是非相对论的薛定谔方程。其中， $\psi$  是平面偏振光的波动方程 ( $E_d=h\nu_d$ ,  $p_d=h/\lambda_d$ )。(22) 式对应于能量求和公式  $T+V=H$ 。对于氢原子的 1s 电子，

$$E_d=h\nu_d, p_d=h/\lambda_d=h/(274\lambda_e). \quad (23)$$

#### 5. 电子半径、原子半径和氢原子结构模型

假设 2 提出，自由电子的小环在变成氢原子的核外电子时，通过惠更斯迭代过程变成大环。也就是说，1s 电子的半径是自由电子的 274 倍。这样，基态氢原子的结构为：氢核位于 274 个二级小波围成的圆的圆心，基态电子闭合弦半径(即氢原子半径，也称玻尔半径，记为  $a_0$ )为

$$a_0 = r_{1s} = 274\lambda/2\pi, \quad (24)$$

波长的值是  $\lambda=h/2mc=1.213 \times 10^{-12}$  米。自由电子的半径是  $r_e=1.213 \times 10^{-12} \div 2\pi=1.929 \times 10^{-13}$  米。因此， $\lambda_d=2\pi r_d$ ,  $a_0=r_d=274r_e=274 \times 1.929 \times 10^{-13}$  米 =  $5.2917721092 \times 10^{-11}$  米，计算值与玻尔半径的值一致。

从以上的介绍的内容可以看出，自由电子和氢原子中的电子都是环状的，可以说电子是在一个平面上

运动。将氢原子中的电子运动范围推广到三维空间是在不了解电子结构及基本假设 2 而选择的。现在看来是不正确的（“核外电子的运动是在随机的形式神出鬼没地运动”的观念就是这种轻率的选择导致的）。正确的选择是将 (22) 式推广到二维空间之中，再用它用来计算氢原子的一些起物理量。方法是将 (22) 式中的  $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$  改为  $\nabla^2$ ，然后令  $z=0$ ，从而在  $x^2 + y^2 = r_d^2$  的条件下求解薛定谔方程。

以前，人们认为氢原子 s 壳层中电子的波函数是球对称的，角量子数  $L_d=0$ ，因此其轨道磁矩为零。现在看来，这也是不正确的。我们认为，束缚态电子在核外运动是自由电子的自旋运动的加强运动（一种组合运动）。自旋角动量也是这种组合运动的结果。

当电子的环形实体围绕原子核运动时，可以达到平衡状态。平衡状态方程是

$$\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r_d^2} = \frac{m_d v^2}{r_d}. \quad (25)$$

当  $n=1$ ,  $r_d=a_0$  时，这个方程的解是， $v=ac$ 。不难看出，定域实在论在这样的量子力学体系中仍然有很高的地位。

利用上面的电子结构模型解决电子自旋的具体形式问题，还可以成功的应用于原子和分子的计算【6, 7】。而现有的量子力学对于电子自旋

## 6. 根据基本假设 1 和 2（电子结构模型和氢原子模型）建立狄拉克方程

我们还可以根据光结的电子结构模型推导出 Klein Gordon 方程和 Dirac 方程【1, 4】。(2) 式  $(\psi_d(x, t) = A_d e^{-i(E_d t - x p_d)/\hbar})$  对  $t$  求 1 阶导数，得

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi_d = E_d \psi_d. \quad (26)$$

以氢原子为例，原子核外电子的总能量为  $\sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$ 。根据 (26) 式我们知道

$$\hat{E}_d = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}. \quad (27)$$

这是粒子的总能量算符。氢核外电子的能量  $E_d$  为  $T+V$ ，而它的总能量  $E$  为（电子的轨道动能  $T$ ）+（势能  $V$ ）+（电子的内禀能量  $mc^2$ ）:

$$T + V + m_e c^2 = E, \quad (28)$$

这里， $m_d$  是电子的质量  $m_e$ ,  $T=m_e v^2/2=ac p_d/2$ ,  $V=-2T=-m_e v^2=-ac p_d$ ,  $T+V=-(1/2)ac p_d$ 。维里定理是经典多粒子平衡系统的动力学定理。相对论效应也不能破坏它。在玻尔的氢原子模型中，它一定成立。在假设 2 背景之下，维里定理也适用于类似土星环的氢原子。现有的量子力学也使用维里定理。比较维里定理  $2T+V=0$ ,  $p_d=m_e v$  and  $v=ac$  (where  $Z=1$ ), (28) 式和“从经典力学平衡方程式推导出来的 (25) 式”，我们可以得到： $T=m_e v^2/2=ac(m_e v)/2=ac p_d/2$ ,  $V=-2T=-m_e v^2=-ac p_d$ ,  $T+V=-(1/2)ac p_d$  和

$$T+V+m_e c^2=-(1/2)ac p_d+m_e c^2=E. \quad (29)$$

运动粒子的动能和相对论能量之间的关系是  $mc^2-m_e c^2=T=(1/2)ac p_d$ 。使用这个公式来消除 (29) 式中的  $m_e c^2$ ，我们有(下面，为了不引起误解，将省略一些下脚标)

$$-ac p + mc^2 = E. \quad (30)$$

(30) 式可以表示运动质点的总能量减去质点的动能等于质点的内能。将 (30) 式中的  $p$  和  $E$  分别替换为 (9) 式和 (20) 式表示的算符，并作用于  $\psi(x, t)$ ，可得

$$-ac \hat{p} \psi + mc^2 \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi. \quad (31)$$

(31) 式就是狄拉克方程。本文导出的狄拉克方程的含义是：在氢原子的电动力学平衡体系中，体系中电子的总能量等于其相对论总能量与其合密顿量之和。如果描述的是负能量粒子的运动，式中各项的符号都要更改。只有单独改变质量的符号，才能得到与狄拉克方程完全相同的形式。但是，人们只找到了正能量的反粒子，而没有找到负质量粒子。(31)式中的  $\alpha$  是一个特定的常数——精细结构常数， $ac$  是电子在基态

氢原子中的拟合经典运动速度（群速度）。但在本文之前，狄拉克方程中的  $\alpha$  并不是一个简单的常数（如果满足一定条件， $\alpha$  可以取 1）。 $\alpha$  的矩阵形式不是从狄拉克推导出来的，而是为了在洛伦兹变换下满足狄拉克方程的协性而写来的。可见，要否定本文给出的  $\alpha$  的意义，并不容易。只有具体求解若干狄拉克方程，看结果是否与事实相符。(31) 式必须对应于方程 (28)-(30) 的能量求和，否则就是错的。如果  $\alpha$  不是精细结构常数，则等式 (30)-(33) 左侧的能量远大于右侧的能量。

如果是原子核外的  $ns$  电子，有效电荷为  $Z^*$ ，基态氢原子的狄拉克方程为

$$-(Z^*/n)\alpha c \hat{p} \psi + mc^2 \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi. \quad (32)$$

对应于 (32) 式的原狄拉克原方程的是

$$-\alpha c \hat{p} \psi + \beta mc^2 \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi. \quad (33)$$

在 (33) 式中,  $\beta = \pm 1$ .  $\alpha = \pm 1$ . 当  $\alpha$  和  $\beta$  都取  $-1$  时, (33) 式变为 (34) 式.

$$-\alpha c \hat{p} \psi - mc^2 \psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi. \quad (34)$$

(34) 式等号两边能量符号不一致是错误的。原因将在后面说。(33) 式的问题在 (34) 式中同样存在。由于这两个方程中的  $\psi$  由 (1) 式定义，因此，(32) 式和 (33) 式中的  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi$  是粒子的内能。众所周知，运动电

子的相对论总能量是  $\sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$ 。(33) 式和 (34) 式的等号两侧的绝对值不能大于它。它等于

$\sqrt{(mc^2 + pc)^2 - 2pmc^3}$ ，但小于  $(mc^2 + pc)$ 。如果  $\alpha$  和  $\beta$  都取  $+1$ ，那么 (33) 式的左边大于右边（即，等式不成立）。在  $\alpha$  和  $\beta$  都取  $-1$  的前提下，即使负能量粒子由 (34) 式描述，该方程也不成立。原狄拉克方程 (31) 式左侧第一项 ( $\alpha c p \psi$ ) 被错误地放大了 137 倍。在  $\alpha = \pm 1$  被承认的前提下，无论  $\alpha$  和  $\beta$  的符号相同还是相反，(31) 式都不对。这从 (30) 式可以直观地看出来。 $pc$  的值等于  $mv c$  大于  $mv^2$ 。如果 (30) 式中的  $\alpha$  等于 1，其左边就是  $(mv c + mc^2)$  大于右边的  $(mv^2 + mc^2)$ 。

与 (32) 式表示的原始狄拉克方程相比，本文导出的狄拉克方程 [(33) 式] 至少有 3 个优点：第一， $\alpha$  的意义明确；第二，方程更符合能量求和法；第三，(29) 式和 (33) 式是推导出来的，而狄拉克纯粹凭直觉写出了他的方程。

取 (2) 式对  $t$  的二阶偏导数，并将其与 (25) 式进行比较。我们可以得到

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi = \hat{E}^2 \psi. \quad (35)$$

适用于粒子整体运动的相对论总能量为  $E = \sqrt{m^2 c^4 + p^2 c^2}$ 。对等式两边求平方，用  $c$  除各项，然后移动各项，得到

$$(E/c)^2 - p^2 = m^2 c^2. \quad (36)$$

将 (36) 式中的  $E^2$  和  $p^2$  分别更换成 (35) 式和 (27) 式中的算符，可得

$$-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi + \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi = m^2 c^2 \psi. \quad (37)$$

(37) 式就是 Klein-Gordon 方程。其中， $\psi$  是平面偏振光的波动方程。(37) 式对应于相对动量平方  $(E/c)^2 = m^2 c^2 + p^2$  的表达式。

德布罗意波（即假设 2 中的拍波）也是拟合物质波。这个拟合波的频率是基本光子频率的  $1/274$ 。 $h\nu_d$  为合成波的动能  $T$ （其中  $\nu_d$  为拟合物质波的频率，即德布罗意物质波的频率）。拟合物质波的拟合速度（视速度）是  $v = \alpha c$ 。这个速度以前被称为德布罗意波的群速度。拟合物质波的能量和动量的关系也是经典力学关系：

$T=pv/2=acp/2$ . 既然拟合了经典运动, 所用的计算方法必然包括经典力学方法. 这种情况下, (10) 式中的  $h\nu_d=E_d$  是质点的动能  $E_k=T$ . 同时, 我们有  $\frac{\partial}{\partial t}\psi = -i\frac{E}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}\psi$ ,  $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi = E\frac{\partial}{\partial t}\psi$ . 将 (19) 式与 (27) 式相比较, 考虑  $E_k=T$  和  $T+V=E$ , 也可以得到薛定谔方程.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi + V\psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi. \quad (38)$$

## 7. 同时根据定域实在论的物质结构模型和波动力学计算氢分子

量子化学家计算分子和原子需要知道体系的势能函数. 然而, 由于电子的运动状态未知, 因此, 大多数原子分子体系的势能函数是未知的, 即使有些是已知的, 也不能根据它轻松地计算出正确的原子分子数据. 必须主观地试探势能函数的形式, 即量子化学家使用的体系势能函数是试探函数. 这使量子化学方法是半经验方法. 摘掉半经验方法的帽子而轻松计算出一些分子的数据一定是量子化学家梦寐以求的.

利用纯数学的方法将 (22) 式推广到三维情况, 可得

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right]\psi = H\psi. \quad (39)$$

对于氢原子而言, 这种“推广”操作相当于承认核外电子的运动不是经典意义的简单运动. 将势能函数  $V=-Ze^2/r$  代入 (39) 式计算, 可得到氢原子的电子的能量在核外一个球壳中有最大值. 这个最大值处的球壳半径就是氢原子的半径. 氢原子的电子能级也可以从薛定谔方程的解中反映出来. 简单地说, 就是光结电子结构模型不排斥已有的量子力学计算方法 (只要能给出势能函数, 原子和分子都可以利用类氢原子而大大简化计算过程). 只需将“几率密度”概念修改为“能量密度”概念.

根据**假设 1-2**可知, 无论是自由电子还是核外电子, 都是环状的波, 且核外电子环是核外电子波动的相轨线又恰好是核外电子的经典运动轨道和质线. 在光结电子结构模型的框架内, 以电子环的直径为轴, 将电子环旋转 180 度就制造出了自旋方向相反的电子. 电子配对就是这样的自旋方向相反的电子完全重合. 两个自由电子配对后, 其总能量降低. 势场中两个电子配对, 不会出现无穷大势能. 这是因为, 在电子轨道的尺度内, 非自由电子配对不符合库仑定律 (大家知道, 库仑定律只对点电荷源的中心力场适用. 但是, 光结是子结构模型表明, 电子不是点电荷). 这就是本文的**假设 3**. **假设 1**和**假设 2**决定了**假设 3**中的电子配对就像频率相同的两束光重叠 (其机制就像左旋圆偏振光与右旋圆偏振光组合成平面偏振光. 当自旋方向相反的两个电子之间的距离小到一定程度时, 将严重偏离库仑定律). **假设 3**满足超导理论中的库珀对的条件和功能. 可用归纳法找到电子配对能的规律和经验公式. **假设 1-3**就是光结电子结构模型的主要内容 (可以说, **假设 1-3**与光结电子结构模型是等价的描述).

本文中的三个假设不是独立的, 而是有联系的. 具体地说, 它们都围绕同一个核心. 该核心就是最简圆偏振光子首尾相接而沿一个圆周传播, 构成一个能量定域、电荷恒稳的基本粒子. 这样的电子有三大特点: 组成——最简圆偏振光子; 结构——首尾相接的波环; 重要特性——在势场中, 一段波可按惠更斯原理而扩展成为一个拍波.

氢原子的  $1s^2$  电子的主能级相同, 电离能应该相同. 这两个电子的电离能之差就是氢原子中的  $1s^2$  电子的配对能. 原因是, 如果没有另一个电子的影响,  $1s^2$  这两个电子的电离能就是相同的. 它们的电离能的不同正是这两个电子间的相互作用的结果. 在化学手册中可以找到各原子的  $1s^2$  电子的电离能之差. 根据元素电离能数据, 用回归分析法可以得到  $1s^2$  电子配对能与有效核电荷数的回归方程——(40)式 **【8】**.

$$\Delta I_{\text{paired electron}} = E_{e^-} = (-0.03100Z^{*2} - 16.619Z^* + 3.1613)/n^2. \quad (40)$$

(40) 式中的能量单位是电子伏. 利用不同数量的电离能数据和不同的软件计算出的回归方程略有不同 (有条件的读者请选择更好的统计工具). (40) 式可以看出, 当有效核电荷数为零时, 自由电子配对时放出的能量为  $3.1613eV$ . 这就是自由电子的配对能  $\Delta$ . (40) 式具有两个重要作用: 它使电子-声子相互作用假设不再是必须的; 它提供了测量电子配对能的实验方法. 电子本对能不需要利用微扰法计算. 两个电子完全重

合不会出现无穷大的势能。这可以消除一些过程的重正化 renormalization 需要。

根据本文中的**假设 1**，**假设 2**和**假设 3**可知，氢分子离子就是一个电子球在两个氢核之间的电动力学平衡体系。

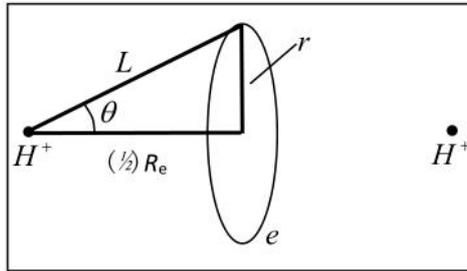


图 1. 氢分子离子  $H_2^+$  的结构示意图。

Figure 1. Hydrogen molecule-ion  $H_2^+$ .

基态氢分子就是两个氢核之间有一对电子重合而的电荷环。这种结构可以达到经典的电动力学平衡。可以用类氢原子计算。计算结果为：离解能和键长分别是  $D_e = -4.2eV$ ，键长  $R_e \approx 0.71 \times 10^{-10} m$  【9】。相对的实验值为： $D_e = -4.75eV$ ， $R_e = 0.74 \times 10^{-10} m$ 。误差与没有考虑核间的磁矩相互作用有关。文献【4】对氢分子离子的计算结构为： $D_e = -6.2eV$ ， $R_e \approx 1.1 \times 10^{-10} m$ 。对应的实验值为  $D_e = -2.8eV$ ， $R_e \approx 1.06 \times 10^{-10} m$ 。对于氢分子离子，离解能的计算结果的误差大。原因是，氢分子离子只有一个电子，其轨道磁矩与核磁矩的相互作用不对称，导致分子不对称从而产生较大的误差。

这是人类首次利用经典结构计算出的有关氢原子的数据。尽管计算过程中利用了经验公式计算电子配对能，但是，这个经验公式是通用的公式，且是根据实验归纳出来的。这比以前主观方法给出经验势能函数的方法要客观得多。计算方法是定域实在论的方法。

利用相同的方法可以计算锂分子  $Li_2$ 。与氢分子不同的是，锂分子的成键电子处于  $n=2$  的能级上。计算结果为：离解能  $D_e = -1.19eV$ ，键长  $R_e \approx 2.56 \times 10^{-10} m$ 。【10】对应的实验值是  $D_e = -1.06eV$ ，键长  $R_e \approx 2.67 \times 10^{-10} m$ 。误差同样与两核之间的核磁相互作用有关。根据本文的基本思想可知，氢分子离子有三个磁偶极子：两个核磁偶极子和一个电子偶极子，且它们的相互作用不对称，导致氢分子离子不像氢分子那样对称。我们可预言同相同的方法计算氢分子离子，相对误差要比氢分子的大。实际情况的确如此【1】。

从图 1 可以直观地看出，本文提供的量子化学计算方法是定域实在论的方法。

本节内容表明，波动力学(量子力学)也可以是定域实在论的。前面几节预示的是定域实在论与波动力学可以兼容。本节将这一点落到实处（在应用方面将其推向了高潮）。

## 8. 行星式原子模型应用到氢原子以外的原子和原子实之上

原子的行星式原子模型是沿用概念。在光结电子模型的框架下，将行星模型改为土星模型概念更贴切一些。实际上，原子的土星模型是拟合出来的而又符合经典物理学规律的模型。原因是，原子中的类卫星环并不是固体环，而是波环，但从整体上看，与环状波的能量相当的质量的确是分布在环状电子上的（这样，就不存在稳定性疑难和量子化疑难）。由于原子的土星模型与波动力学模型是高度兼容的，因此，我们可以同理使用波动力学方法和土星模型下的经典电动力学方法计算原子的能量。换言之，我们可以为所有的原子增加一个行星模型计算方案。

在本文中，以下计算方法可以混合使用：波动力学或矩阵力学方法、玻尔行星模型背景下的经典电动力学方法和将原子或小分子撤分(拟合)成类氢原子或类氢原子实的方法 [类氢体系拟合好以后，直接利用形如 (40) 式的计算结果，不需要重新求解氢原子的薛定谔方程]。氢原子的能量本征值量子力学计算结果的表示方法之一是

$$E_n = -Z^2 \times 1312.0/n^2. \quad (41)$$

式中， $Z$  是核电荷数。原子实释放出来的相对有效核电荷数用  $Z^*$  表示。(43)式是将氢原子的势能函数  $-e^2/r$  代入薛定谔方程的计算结果，能量单位是  $\text{kJ/mol}$ 。用  $Z^*$  代替中的  $Z$ ，可以根据 (41) 式计算原子实的相对有效核电荷数。类氢原子的确定方法是将双电子势能函数撤分为两个单电子势能函数（原本是单电子环的显然不必撤分了），然后将其除以氢原子的势函数。得到的常数就是类氢原子的约化核电荷数（用  $Z$  表示，以便区别于有效核电荷数  $Z$  和  $Z^*$ ）。 $Z$  与氢原子的势能函数之积就是类氢原子的势能函数。其薛定谔方程的解为  $E_n = -Z^2 \times 1312.0/n^2$ 。根据行星模型和维理定理可知，氢原子的能量本征值的计算方法为  $-Ze^2/2r$ 。类氢原子的行星模型计算方法也与氢原子的相同。

从第 1-9 节读者就可以看出，本节的应用结果是必然的。这也是定域实在论量子力学的成功应用实例。

## 9. 光结电子结构模型的有利因素和争议

本文 2-10 节介绍的内容，都对光结电子结构模型为利。因为，这些内容都是以光结电子结构模型为基础的，是光结电子结构模型（或定域实在论量子力学）的成功应用。另外，应用实例比较多，可以排除偶然因素。如果没有量子场论和标准模型理论，取得了这样成绩，量子化学家一定会欣喜若狂。但是，现实是，在量子场论和模型理论诞生之后，这种局面没有出现（相反，是光结电子组成和结构理论问世多年之后，仍然没有被广泛接受）。要知道，量子场论并不能解决电子的组成和结构问题（量子场论和标准模型理论只是描述了电子的一种来源和场的特性）。这里面透露着不公平和不可理喻。因为，量子场论和标准模型理论虽然有优点，但也不是没有弱点，和不适用的地方（它也有未探索到的领域）。它不是一种统治性的理论，也就不应该限制别的理论探索它未探索的领域。上面说“不公正和不可理解”成了光结电子结构模型的不利因素。更详细的说明如下。

标准模型理论的基础是量子场论。光结电子结构模型的不利因素就是与标准模型理论在基本粒子来源和结构方面存在冲突。于是，有人认为光结电子结构模型与量子场论也不一致。以量子场论为基础发展起来的理论不可能只有标准模型理论个分支，也有可能向如图 2 所示的左向发展。这个发展方向包括光结电子结构模型理论，从而实现量子场论与光结电子结构模型接轨。光结电子结构模型显然是电子的下一个层次的组成和结构的理论。既然量子场论尚未讨论电子的内部组成和结构，它就不能限制它的分支理论或别的理论讨论基本粒子的组成和结构，更不能用量子场论为强硬的标准判断新理论的正确性。本文还阐明了，一般量子场论及量子力学的数学形式体系的建立可以从光结粒子结构模型出发（以光结粒子结构模型为源头）。要知道，在本文之前，量子场论和量子力学数学形式体系的建立从来就没有找到这么统一的逻辑起点。

光结电子结构模型不总是处于劣势，在某些方面它比量子场论更成功。这些成功之处是：量子场论对解决量子力化学计算中的半经验方法的问题毫无帮助，而光结电子结构模型可以摘掉量子化学中的半经验方法的帽子；光结电子结构模型可证明源于行星式原子模型方法（经典电动力学方法）与波动力学方法等价和兼容，而量子场论不能完成这种工作；光结电子结构模型可使量子力学理论体系得到美化且可大大简化量子化学计算（量子场论也没有这种功能）。量子场论的某些计算可准确到超过十位有效数字。光结电子结构模型对自由电子自旋角动量的计算结果也得以实现没有误差。

光结电子结构模型中，电子的静止质量来源于波的卷曲而产生一个质量心无平移的实体，其整体表现就是可静止的（具有静止质量的）实体（玻色子变成了费米子）。

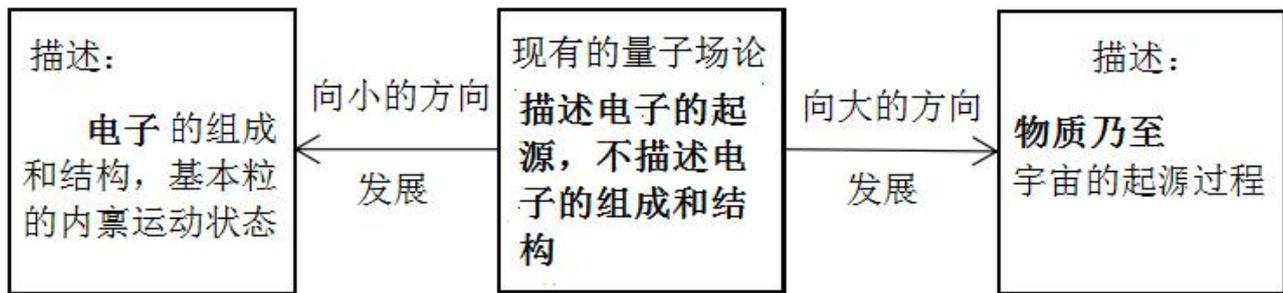


图 2. 量子场论的现状和两个发展方向（向下发展仅针对电子而言）。 **Figure 2.** The rationale and two development directions of quantum field theory (downward development is for electrons only).

量子场论和标准模型理论只确实为探索基本粒子的下个层次的组成和结构提供了一种原则(例如，黑格斯机制)。它们也试图揭示微观物质结构的全部秘密。然而，这种原则和这种努力对于电子来说并没有成功。因此，在量子场论和标准模型理论中，电子仍然是最基本的粒子之一。既然这种原则对于电子来说并没有成功，就不能以此原则作为判断标准来评论新的电子的内部组成、结构和运动状态模型。

理论物理学发展的一种现实的格局是，数学、量子场论和标准模型理论引领物质结构理论的发展。本文介绍的工作格局相反：物质结构理论影响量子力学理论的完善和发展。在人类认识到原子是由原子核和电子组成的时候量子力学就建立起来了。在随后日子里，物理结构理论向下发展了两三个层次却对量子力学没有任何帮助。我们没有理由认为本文选择的理论研究格局在任何时候的任何分支领域中都劣于大众化的理论研究格局。本文介绍的物理学理论研究格局效果有可能正是本文的价值所在。本文的另一种价值的体现是，同时从理论上和应用事例上证明玻尔行星模型与量子力学等价或高度兼容（两种背景下计算方法可以混合使用）。作者的完成了下面列出的 11 个“在人类社会中第一次发生”的科学事件。就是说，以下十项都科技史上首次被完成的填补世界空白的突破性工作。以下 11 个科学事件的发生都是以揭示了电子的内部组成、结构和运动形式为基础的。

(1) 创建了完整的光结电子结构模型（提出了一种新的电子内部组成、结构和运动的方案，并提供了数百个应用事例）。

(2) 利用经典结构、经典转动和经典电磁学计算出了电子半径。

(3) 利用经典结构和经典力学方法计算出了电子自旋角动量和电子自旋磁矩，以及电子自旋角动量算符和电子自旋磁矩算符。

(4) 利用经典结构、经典转动和经典力学方法计算出了氢原子的电子轨道角动量（注：以前人们认为氢原子中的电子没有轨道运动）。

(5) 利用经典结构和经典力学方法计算出了氢原子的电子轨道磁矩及其算符（注：以前人们认为氢原子中的电子没有轨道运动）。

(6) 利用经典结构和经典力学方法得到了电子配对能的实验测量方法——已经配对的两个电子的电离能之差。

(8) 利用经典结构和经典力学方法计算出了氢分子的和氢分子离子的键长和离解能。

(9) 利用电子内部的组成、结构和内禀运动形式，以及经典力学规律（例如：经典动量速度关系  $p=mv$ ，经典动能关系  $E_k=p^2/2m$ ，电动力学下的行星运动方程，角动量表达式  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$  和行星式平衡体系的电势能表达式  $f(r, Z, e, \dots)$  等）建立量子力学的数学形式体系。这为量子力学方法与玻尔行星模型背景下的经典力学方法兼容甚至等价奠定了理论基础。

(10) 利用电子内部的组成、结构和内禀运动状态给出了电子自旋函数的具体形式、电子轨道运动的角动量算符、电子轨道运动的磁矩算符、狄拉克方程中的  $\alpha$  的具体意义——精细结构常数。

(11) 建立了行星模型或土星模型方法与量子力学方法兼容的理论基础以及这两种方法混合使用的大量

事例。

上述主要成果可以用列表的方式直观的展示。

### 参考文献

- [1] Runsheng Tu. Progress and Review of Applied Research on New Theory of Electronic Composition and Structure. *Infinic energy*, 2024. 167: 35-51.
- [2] Mark Srednicki. *Quantum Field Theory*. Cambridge University Press, Cambridge. 2010: 641.
- [3] 温伯格《量子场论》(第2卷). 2014年5月. 世界图书出版公司.
- [4] 涂润生. 量子力学之定域实在论回归, 剑桥学者出版社. 2015年, 泰恩河畔, 纽卡斯尔: 290。
- [5] 唐敬友. 原子物理与量子力学. 北京大学出版社, 2011年, 北京: 235.
- [5] 涂润生. 定域实在论量子力学的一些成功应用——揭示了共价键的性质和几种分子的力学平衡的定量分析. *现代物理学杂志*, 2014年第5卷, 第6期: 309-318.
- [7] 涂润生. 测量原子中电子相互作用能的实验方法的原理和应用. *国际学术研究报告*, 2016; 2(8): 187-200.
- [8] 费因曼. 今天的物理学 (M), 叶悦等译, 北京: 科学出版社, 1981: 168—173.  
<http://mtoou.info/jueban/685000.html>
- [9] Feynman, R. (translated by Ye Yue et al.). *Today's Physics*. Beijing, Science Press. 1981: 168-173. FIX.  
<http://mtoou.info/jueban/685000.html>
- [10] Hriday Kedia; Iwo Bialynicki-Birula; Daniel Peralta-Salas; William T.M. Irvine. *Tying Knots in Light Fields*, 2013:150404.1-150404.5.

## Theory of wave element material structure and its application review

Runsheng Tu

(Huanggang Normal University, China)

### Abstract

Existing theories of material structure and quantum field theory cannot describe the specific sources of fundamental particles. In quantum field theory, the generation of particles is the instantaneous transformation of the field, rather than the true creation of particles. It is necessary to explore the composition (or source) of the next level of elementary particles or fields. The material structure theory of "all fundamental particles mainly originate from photons" has great advantages in combining logic and fact. By utilizing this new theory of material structure, quantum theory, Bohr theory, and classical electromagnetic theory can be mixed to describe the same particle. Both this new theory of material structure and its application examples demonstrate that there is no longer a gap between the micro world and the macro world in calculating the spin angular momentum of basic particles, atomic ionization energy, and molecular dissociation energy.

**Keywords:** theory of material structure of wave elements, Light-knot electronic structure model, electron spin magnetic moment operator, quantum mechanics, compatibility between quantum mechanics and classical electromagnetic.