نظریه‌ی ِ کوانتومی ِ الکترون. [1]

پی. اِی. اِم. دیراک

کالج ِ سنت‌جان، کمبریج.

(مکاتبه با آر. اچ. فاوْلر، عضو ِ انجمن ِ سلطنتی ـ دریافت 2 ژانویه‌ی 1928.)

وقتی مکانیک ِ کوانتومی ِ جدید برای ِ مسئله‌ی ساختار ِ اتم با الکترون‌های ِ بارنقطه‌ای [2] به کار برده می‌شود نتایجی که با تجربه بخواند نمی‌دهد. موارد ِ اختلاف شامل ِ پدیده‌ی "دولایه‌گی" است، این که تعداد حالت‌های ِ پایای ِ الکترون در اتم دو برابر ِ تعدادی است که نظریه می‌دهد. برای ِ رفع ِ این مشکل، گودسْمیت و اُولِنبِک این ایده را مطرح کردند که الکترون یک تکانه‌یِ زاویه‌ایِ اسپینی به اندازه‌ی ِ نصف ِ کوانتم، و یک گشتاور مغناطیسی به اندازه‌یِ یک مگنتون ِ بور دارد. این مدل برای الکترون توسط ِ پائولی [1] در چارچوب ِ مکانیک ِ جدید ارائه شده است، و داروین [2] با استفاده از نظریه ای هم‌ارز نشان داده است که این فرض برای ِ طیف ِ اتم‌های ِ هیدروژن‌گونه در اول‌ین مرتبه‌ی دقت نتایج ِ موافق با تجربه می‌دهد.

این سؤال باقی می‌ماند که چرا طبیعت این مدل ِ خاص را به جای تصویر ِ بارنقطه‌ای برای ِ الکترون انتخاب کرده است. بهتر بود در روش‌های ِ قبلی ِ به کارگیری ِ مکانیک ِ کوانتومی برای ِ بارنقطه‌ای نقصی پیدا می‌شد، طوری که پس از برطرف کردن ِ آن پدیده‌ی دولایه‌گی به طور ِ یک‌جا و بدون ِ فرض‌های ِ اضافی به دست می‌آمد. در مقاله‌ی حاضر نشان داده می‌شود که چنین است، این که نقص ِ نظریه‌های ِ قبلی ناسازگاری ِ آن‌ها با نسبیت، یا به تعبیری، [ناسازگاری با] تبدیلات ِ عمومی ِ مکانیک ِ کوانتومی است. دیده خواهد شد که ساده‌ترین همیلتونی برای ِ الکترون ِ بارنقطه‌ای که تواماً با اقتضائات ِ نسبیت و

---

[1] این مقاله ترجمه‌ای است از:

P. A. M. Dirac, "*The Quantum Theory of the Electron*", Proceedings of the Royal Society of London A, Vol. 117, No. 778 (Feb. 1, 1928), 610-624.

مترجم: امیرحسین فتح‌اللهی

[2] منظور از الکترون ِ بارنقطه‌ای، الکترونی است که یک بار ِ نقطه‌ای بدون ِ هر خاصیت ِ دیگر مانند ِ اسپین یا ممان ِ دوقطبی فرض شود. ویراستار ِ ترجمه‌ی فارسی.

تبدیلاتِ عمومی هم‌خوانی داشته باشد تمامِ پدیده‌هایِ دولایه‌گی را، بدونِ هیچ فرضِ اضافی‌ای، توضیح می‌دهد. به هر صورت، مدلِ الکترونِ چرخان، دستِ کم در اولین رتبه‌ی تقریب، بسیار واقعی است. به نظر می‌رسد مهم‌ترین نارسایی یِ این مدل این است که آن طور که از آن نتیجه می‌شود، اندازه یِ تکانه یِ زاویه‌ای یِ یک الکترون که در مداری ناشی از یک میدانِ نیرو یِ مرکزی حرکت می‌کند ثابت نیست.

§ 1. ملاحظاتِ پیشین نسبیتی.

بر طبقِ نظریه‌ی کلاسیکی، همیلتونیِ نسبیتی برایِ الکترونِ نقطه‌ای که در میدانِ الکترومغناطیسیِ دل‌خواه با پتانسیلِ اسکالرِ A_0 و پتانسیلِ برداریِ $\mathbf{A}$ حرکت می‌کند می‌شود

$$\mathrm{F} \equiv \left(\frac{\mathrm{W}}{c} + \frac{e}{c}\mathrm{A}_0\right)^2 + \left(\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + m^2c^2,$$

که در آن $\mathbf{p}$ بردارِ تکانه است. گُردُن [3] پیش‌نهاد کرده است که عمل‌گرِ معادله یِ موجِ نظریه‌ی کوانتومی باید همانندِ روشِ نظریه‌ی غیرنسبیتی به دست آید، یعنی با جاگذاریِ

$$\begin{aligned} \mathrm{W} &= i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \\ p_r &= -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_r}, \qquad r = 1, 2, 3, \end{aligned}$$

در F. با این [جاگذاری] معادله یِ موج می‌شود

$$\mathrm{F}\psi \equiv \left[\left(i\hbar\frac{\partial}{c\,\partial t} + \frac{e}{c}\,\mathrm{A}_0\right)^2 + \Sigma_r\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x_r} + \frac{e}{c}\,\mathrm{A}_r\right)^2 + m^2c^2\right]\psi = 0, \qquad (1)$$

که تابعِ موجِ ψ تابعی از x_1، x_2، x_3 و t است. آن‌چه به دست آمد به دو مشکل برمی‌خورد. اولی به تعبیرِ فیزیکی یِ ψ مربوط است. گُردُن، و به طورِ مستقل کلاین [4]، با در نظر گرفتنِ قضییه‌هایِ پایسته‌گی، فرض کردند که اگر ψ_m و ψ_n دو حل باشند

$$\rho_{mn} = -\frac{e}{2mc^2}\left\{i\hbar\left(\overline{\psi}_m\frac{\partial\psi_n}{\partial t} - \overline{\psi}_n\frac{\partial\psi_m}{\partial t}\right) + 2e\mathrm{A}_0\psi_m\overline{\psi}_n\right\}$$

و

$$\mathbf{I}_{mn} = -\frac{e}{2m}\left\{-i\hbar\,(\psi_m \text{ grad } \overline{\psi}_n - \overline{\psi}_n \text{ grad } \psi_m) + 2\,\frac{e}{c}\,\mathbf{A}_m\,\psi_m\overline{\psi}_n\right\}$$

باید به عنوانِ بار و جریانی تعبیر شوند که به گذارِ $m \to n$ وابسته‌اند. این [بار و جریان] تا جائی که به گسیل یا جذبِ تابش مربوط است، قانع‌کننده است؛ امّا به اندازه‌ی تعبیرِ مکانیکِ کوانتمی یِ غیرنسبیتی، که برایِ جواب دادن به سؤالِ زیر بار آمده است [5]، عمومی نیست. [سؤال:] هنگامی که یک سیستم با تابعِ موجِ داده شده‌ی ψ_n نمایش داده می‌شود، احتمالِ این که هر متغیر دینامیکی در یک زمانِ مشخص مقداری را در محدوده‌ی مشخصی بگیرد چیست؟ تعبیرِ گُردُن—کلاین چنین سؤالاتی را در موردِ مکانِ الکترون جواب می‌دهد (با استفاده از ρ_{mn})، ولی نه اگر این سؤالات به تکانه، تکانه‌ی زاویه‌ای یا هر کدام از دیگر متغیرهایِ دینامیکیِ الکترون برگردد. در صورتی که انتظارمان باید این باشد که تعبیرِ نظریه‌ی نسبیتی به همان اندازه‌ی تعبیرِ غیرنسبیتی عمومی باشد.

تعبیرِ عمومیِ مکانیک‌کوانتومیِ غیرنسبیتی بر اساسِ نظریه‌ی تبدیل است، که با معادله‌ی موج به شکلِ زیر ممکن شده است

$$(\mathrm{H} - \mathrm{W})\ \psi = 0, \tag{2}$$

که در W یا $\partial/\partial t$ خطی است، طوری که تابعِ موج در هر لحظه تابعِ موج در هر زمانِ بعدی را معین می‌کند. معادله یِ موجِ نظریه‌ی نسبیتی نیز باید در W خطی باشد تا تعبیرِ عمومی ممکن بشود.[3]

مشکلِ دومی که با تعبیرِ گُردُن وجود دارد از این جا می‌آید که با گرفتنِ مزدوج مختلط از معادله‌ی (1) داریم

$$\left[\left(-\frac{\mathrm{W}}{c} + \frac{e}{c}\mathrm{A}_0\right)^2 + \left(-\mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + m^2c^2\right]\psi = 0,$$

[3] منظورِ دیراک از این پاراگراف این است: معادله یِ شرودینگرِ غیرنسبیّتی در زمان از مرتبه یِ 1 است، و بنا بر این برا یِ آن که مقدارِ تابع در لحظه یِ $t + \delta t$ معلوم شود، باید مقدارِ خودِ تابع، و نه مشتق‌ها یِ آن، در لحظه یِ t معلوم باشد. اگر معادله در زمان از مرتبه یِ 2 باشد، باید علاوه بر خودِ تابع، مشتقِ آن هم در t مشخّص باشد تا بتوان مقدارِ تابع را در $t + \delta t$ به دست آورد. به علاوه، برا یِ معادله‌ها یِ مرتبه یِ 2، مثلاً معادله یِ کلاین ـ گُردُن، تعبیرِ احتمالی یِ تابعِ موج ممکن نیست. ویراستارِ ترجمه یِ فارسی.

که همان چیزی است که با تبدیلِ e به $-e$ [در معادله یِ (1)] به دست می‌آید. به این ترتیب معادله یِ موجِ (1) هم الکترونی با بارِ e را توصیف می‌کند هم الکترونی به بارِ $-e$ را. به طورِ مشخص، در حدِ اعدادِ کوانتومیِ بزرگ، بعضی از جواب‌ها یِ معادله یِ موج بسته‌موج‌هائی هستند که مانندِ حرکتِ بارِ $-e$ در نظریه‌ی کلاسیک حرکت می‌کنند، در حالی که بعضی دیگر از بسته‌موج‌ها مانندِ بارِ e یِ کلاسیک حرکت می‌کنند. برای این دسته‌ی دوّم از حل‌ها W منفی است. در نظریه‌ی کلاسیک مشکلِ مقدارهای منفیِ W با کنار گذاشتنِ آن‌ها حل می‌شود. امّا این کار در نظریه‌ی کوانتومی شدنی نیست، زیرا در حالتِ کلی یک اختلال می‌تواند گذار از حالت‌هایِ W مثبت به حالت‌هایِ W منفی را سبب شود. چنین گذاری به تبدیلِ یک بارِ $-e$ به بارِ e در آزمایشگاه منجر می‌شود، پدیده‌ای که تا به حال دیده نشده است. پس یک معادله‌موجِ نسبیتیِ درست باید چنان باشد که حل‌هایش به شکلِ دو دسته‌ی غیرِ آمیخته از جواب‌هائی باشد که به بارهای e و $-e$ نسبت داده می‌شوند.

در مقاله‌یِ حاضر ما فقط به مشکلِ اوّل از دوتایِ گفته‌شده می‌پردازیم. در نتیجه نظریه‌ی به دست آمده هنوز فقط یک تقریب است، امّا به اندازه‌ای خوب است که تمامِ پدیده‌های دولایه‌گی را بدونِ فرض‌هایِ اضافه به دست آورد.

§ 2. همیلتونی، در غیابِ میدان

مسئله‌ی ما این است که معادله‌ی موجی به شکلِ (2) به دست آوریم تا تحتِ تبدیلِ لورنتس ناوردا باشد، و در حدِ اعدادِ کوانتومیِ بزرگ معادلِ (1) باشد. در ابتدا حالتِ بدونِ میدان را در نظر می‌گیریم، که معادله‌ی (1) با جاگذاریِ

$$p_0 = \frac{\mathrm{W}}{c} = i\hbar\frac{\partial}{c\,\partial t}$$

به معادله‌ی زیر تقلیل پیدا می‌کند:

$$\left(-p_0^2 + \mathbf{p}^2 + m^2c^2\right)\psi = 0. \tag{3}$$

تقارنِ بینِ p_0 و p_1 و p_2 و p_3 که خواستِ نسبیت است نشان می‌دهد که همیلتونی‌ای که می‌خواهیم در p_0 خطی باشد باید در p_1 و p_2 و p_3 هم خطی باشد. پس معادله‌یِ موجِ ما باید به شکلِ

$$(p_0 + \alpha_1\, p_1 + \alpha_2\, p_2 + \alpha_3\, p_3 + \beta)\, \psi = 0, \tag{4}$$

باشد، که فعلاً تنها چیزی که درباره‌ی متغیرهای دینامیکی یا عمل‌گرهای α_1 و α_2 و α_3 و β می‌دانیم این است که مستقل از p_0 و p_1 و p_2 و p_3 هستند، یعنی با t و x_1 و x_2 و x_3 جابه‌جا می‌شوند. از آن‌جائی که حالتی را در نظر می‌گیریم که در آن ذره در فضای خالی حرکت می‌کند، پس تمامِ نقاطِ فضا معادل‌اند، و در نتیجه t و x_1 و x_2 و x_3 در همیلتونی وجود ندارند. پس α_1 و α_2 و α_3 و β مستقل از t و x_1 و x_2 و x_3 هستند؛ یعنی با p_0 و p_1 و p_2 و p_3 جابه‌جا می‌شوند. پس با متغیرهای دینامیکیِ متفاوتی سر و کار پیدا کرده‌ایم که علاوه بر مختصات و تکانه‌ی الکترون هستند، و ممکن است α_1 و α_2 و α_3 و β تابعی از آن‌ها باشند. پس تابع‌موجِ ψ باید متغیرهای دیگری علاوه بر x_1 و x_2 و x_3 و t داشته باشد.

از معادله‌ی (4) نتیجه می‌شود

$$\begin{aligned} 0 &= (-p_0 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta)(p_0 + \alpha_1 p_1 + \alpha_2 p_2 + \alpha_3 p_3 + \beta)\ \psi \\ &= [-p_0^2 + \Sigma\alpha_1^2 p_1^2 + \Sigma(\alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1)p_1 p_2 + \beta^2 + \Sigma(\alpha_1\beta + \beta\alpha_1)p_1]\ \psi, \end{aligned} \tag{5}$$

که در آن Σ به جای‌گشتِ چرخه‌ایِ شاخص‌های 1 و 2 و 3 اشاره می‌کند. عبارتِ بالا با (3) یکی است اگر

$$\left.\begin{array}{lll} \alpha_r^2 = 1, & \alpha_r\alpha_s + \alpha_s\alpha_r = 0 & (r \neq s) \\ \\ \beta^2 = m^2c^2, & \alpha_r\beta + \beta\alpha_r = 0 & \end{array}\right\} \quad r, s = 1, 2, 3.$$

اگر قرار دهیم $\beta = \alpha_4 mc$، این شرط‌ها می‌شوند

$$\alpha_\mu^2 = 1 \qquad \alpha_\mu\alpha_\nu + \alpha_\nu\alpha_\mu = 0\ (\mu \neq \nu) \qquad \mu, \nu = 1, 2, 3, 4. \tag{6}$$

می‌توانیم فرض کنیم در یک تصویرِ ماتریسی، α_μ ها با ماتریس‌هائی توصیف شوند که عناصرشان $\alpha_\mu(\zeta',\ \zeta'')$ است. در این صورت تابع‌موجِ ψ باید تابعی از ζ، و x_1 و x_2 و x_3 و t باشد. نتیجه‌ی ضربِ α_μ در ψ تابعِ $(\alpha_\mu\psi)$ از x_1، x_2، x_3، t، و ζ است با تعریفِ

$$(\alpha_\mu\psi)(x, t, \zeta) = \Sigma_{\zeta'}\ \alpha_\mu(\zeta\zeta')\ \psi(x, t, \zeta').$$

حالا باید ۴ ماتریسِ α_μ را طوری پیدا کنیم که (6) را برآورده سازد. از ماتریس‌هایِ زیر استفاده می‌کنیم

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},\ \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

که پائولی [6] برای توصیفِ سه مؤلفه‌ی تکانه‌زاویه‌ایِ اسپین معرفی کرد. این ماتریس‌ها خاصیت‌هایِ

$$\sigma_r^2 = 1 \qquad \sigma_r\sigma_s + \sigma_s\sigma_r = 0, \qquad (r \neq s), \tag{7}$$

را دارند که ما برای α ها لازم داریم. امّا نمی‌توانیم σ ها را به عنوانِ سه تا از α ها بگیریم، زیرا در این صورت چهارمین α را نمی‌شود پیدا کرد. باید σ ها را چنان در قطر گسترش دهیم تا دو سطر و ستون بیش‌تر داشته باشند، چنان که بتوانیم سه ماتریسِ اضافیِ ρ_1 و ρ_2 و ρ_3 را به شکلِ σ_1 و σ_2 و σ_3، ولی با سطر و ستونِ متفاوت معرفی کنیم، به این ترتیب:—

$$\sigma_1 = \begin{Bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{Bmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{Bmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{Bmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{Bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{Bmatrix},$$

$$\rho_1 = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{Bmatrix}, \quad \rho_2 = \begin{Bmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \end{Bmatrix}, \quad \rho_3 = \begin{Bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{Bmatrix},$$

ρ ها از σ ها و با جابه‌جاییِ سطرهای دو و سه، و ستون‌های دو و سه به دست آمده‌اند. حالا علاوه بر معادلاتِ (7) داریم

$$\left.\begin{array}{lll} \rho_r^2 = 1 & \rho_r\rho_s + \rho_s\rho_r = 0 & (r \neq s), \\ \rho_r\sigma_t = \sigma_t\rho_r & \text{و هم‌چنین} & \end{array}\right\}. \tag{7'}$$

حالا اگر بگیریم

$$\alpha_1 = \rho_1\sigma_1, \qquad \alpha_2 = \rho_1\sigma_2, \qquad \alpha_3 = \rho_1\sigma_3, \qquad \alpha_4 = \rho_3$$

تمامِ شرط‌های (6) برآورده می‌شود، به عنوانِ مثال

$$\alpha_1^2 = \rho_1\sigma_1\rho_1\sigma_1 = \rho_1^2\sigma_1^2 = 1$$

$$\alpha_1\alpha_2 = \rho_1\sigma_1\rho_1\sigma_2 = \rho_1^2\sigma_1\sigma_2 = -\rho_1^2\sigma_2\sigma_1 = -\alpha_2\alpha_1.$$

معادله‌های زیر برای استفاده‌های بعدی لازم اند:

$$\left.\begin{array}{r} \rho_1\rho_2 = i\rho_3 = -\rho_2\rho_1 \\ \sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3 = -\sigma_2\sigma_1 \end{array}\right\}, \tag{8}$$

و هم‌چنین معادله‌هائی که با جای‌گشتِ چرخه‌ایِ شاخص‌ها به دست می‌آیند.

حالا معادله‌موجِ (4) به این شکل در می‌آید

$$[p_0 + \rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) + \rho_3\, mc]\ \psi = 0, \tag{9}$$

که در آن $\boldsymbol{\sigma}$ بردارِ $(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ است.

§ 3. اثباتِ ناوردائی تحتِ تبدیلِ لورنتس.

معادله‌ی (9) را از چپ ضرب در ρ_3 کنیم. با کمکِ (8) می‌شود

$$[\rho_3 p_0 + i\rho_2(\sigma_1 p_1 + \sigma_2 p_2 + \sigma_3 p_3) + mc]\ \psi = 0.$$

با گرفتنِ

$$\begin{gathered} p_0 = ip_4, \\ \rho_3 = \gamma_4, \qquad \rho_2\sigma_r = \gamma_r, \qquad r = 1, 2, 3, \end{gathered} \tag{10}$$

خواهیم داشت

$$[i\Sigma\gamma_\mu p_\mu + mc]\ \psi = 0, \qquad \mu = 1, 2, 3, 4. \tag{11}$$

p_μ تحتِ تبدیلِ لورنتس مطابقِ قاعده‌یِ زیر تبدیل می‌شود

$$p'_\mu = \Sigma_\nu a_{\mu\nu} p_\nu,$$

که ضرایبِ $a_{\mu\nu}$ c ـ عددهایی اند که روابطِ زیر را برآورده می‌کنند

$$\Sigma_\mu a_{\mu\nu} a_{\mu\tau} = \delta_{\nu\tau}, \qquad \Sigma_\tau a_{\mu\tau} a_{\nu\tau} = \delta_{\mu\nu}.$$

بنا بر این معادله‌ی موج تبدیل می‌شود به

$$\left[i\Sigma\gamma'_\mu p'_\mu + mc\right]\psi = 0, \tag{12}$$

که در آن

$$\gamma'_\mu = \Sigma_\nu a_{\mu\nu}\gamma_\nu.$$

اینک، برایِ γ_μ ها، مانندِ α_μ ها، داریم

$$\gamma_\mu^2 = 1, \qquad \gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 0, \qquad (\mu \neq \nu).$$

به طورِ فشرده این روابط را می‌توان به صورتِ زیر جمع کرد:

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = 2\delta_{\mu\nu}.$$

داریم:

$$\begin{aligned}\gamma'_\mu\gamma'_\nu + \gamma'_\nu\gamma'_\mu &= \Sigma_{\tau\lambda} a_{\mu\tau}\, a_{\nu\lambda}\left(\gamma_\tau\,\gamma_\lambda + \gamma_\lambda\,\gamma_\tau\right)\\ &= 2\Sigma_{\tau\lambda} a_{\mu\tau}\, a_{\nu\lambda}\,\delta_{\tau\lambda}\\ &= 2\Sigma_\tau a_{\mu\tau}\, a_{\nu\tau} = 2\,\delta_{\mu\nu}.\end{aligned}$$

به این ترتیب γ'_μ ها همان روابطِ γ_μ ها را برمی‌آورند؛ و به این ترتیب می‌توانیم در (10) قرار دهیم

$$\gamma'_4 = \rho'_3, \qquad \gamma'_r = \rho'_2\sigma'_r$$

که، اگر به جای ρ'_2 وρ'_1 قرار دهیم $\rho'_2 = -i\gamma'_1\gamma'_2\gamma'_3$ و $\rho'_1 = -i\rho'_2\rho'_3$، آن وقت ρ' ها و σ' ها همان روابطی را برآورده می‌کنند که مطابق با (7) و (7′) و (8) هستند.

حال نشان می‌دهیم که با یک تبدیل‌ِکانونی می‌توان ρ' ها و σ' ها را به شکل‌ِ ρ ها و σ ها درآورد. از معادله‌ی ${\rho'_3}^2 = 1$ نتیجه می‌شود که مقدارمشخصه‌های ρ'_3 تنها ± 1 هستند. اگر یک تبدیل‌ِکانونی با تابع‌ِ تبدیل‌ِ ρ'_1 روی ρ'_3 اعمال شود داریم

$$\rho'_1\rho'_3(\rho'_1)^{-1} = -\rho'_3\rho'_1(\rho'_1)^{-1} = -\rho'_3.$$

از آن‌جا که مقدارمشخصه‌ها تحت‌ِ تبدیلات‌ِ کانونی عوض نمی‌شوند، ρ'_3 باید همان مقدارمشخصه‌های $-\rho'_3$ را داشته باشد. پس مقدارمشخصه‌های ρ'_3 دو تا $+1$ و دو تا -1 هستند. همین نوع بحث برای دیگر ρ' ها و هر یک از σ ها نیز درست است.

از آن‌جا که ρ'_3 و σ'_3 جابه‌جا می‌شوند، می‌توان هم‌زمان آن‌ها را با تبدیل‌ِ کانونی قطری کرد. در این صورت عناصر‌ِ قطری ی‌ِ آن‌ها دو تا $+1$ و دو تا -1 است. پس با یک بازترتیب‌ِ مناسب‌ِ سطرها و ستون‌ها، آن‌ها را می‌توان به شکل‌ِ ρ_3 و σ_3 درآورد. (این امکان که $\rho'_3 = \pm\sigma'_3$ کنار گذاشته می‌شود زیرا ماتریس‌هائی وجود دارند که با یکی جابه‌جا و با دیگری نمی‌شوند).

هر ماتریسی که چهار سطر و ستون دارد را می‌توان به شکل‌ِ زیر نوشت

$$c + \Sigma_r c_r\sigma_r + \Sigma_r c'_r\rho_r + \Sigma_{rs} c_{rs}\rho_r\sigma_s \tag{13}$$

که در آن ضرایب‌ِ c و c_r و c'_r و c_{rs}، شانزده تا c عدد اند. با بیان‌ِ σ'_1 به این شکل، از آن‌جا که آن با $\rho'_3 = \rho_3$ جابه‌جا و با $\sigma'_3 = \sigma_3$ پادجابه‌جا [4] می‌شود، می‌بینیم که

$$\sigma'_1 = c_1\sigma_1 + c_2\sigma_2 + c_{31}\rho_3\sigma_1 + c_{32}\rho_3\sigma_2$$

یعنی به شکل‌ِ

[4] می‌گوئیم a و b پادجابه‌جا می‌شوند اگر $a\,b = -b\,a$.

$$\sigma_1' = \left\{ \begin{array}{cccc} 0 & a_{12} & 0 & 0 \\ a_{21} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & a_{34} \\ 0 & 0 & a_{43} & 0 \end{array} \right\}$$

شرطِ $\sigma_1'^2 = 1$ نشان می‌دهد که $a_{12}\, a_{21} = 1$، $a_{34}\, a_{43} = 1$. حال اگر تبدیلِ کانونی را اعمال کنیم: سطرِ اول در $(a_{21}/a_{12})^{\frac{1}{2}}$ و سطرِ دوم در $(a_{43}/a_{34})^{\frac{1}{2}}$ ضرب می‌شوند، و ستونِ اوّل و سوّم به همان عبارت‌ها تقسیم می‌شوند، و σ_1' به شکلِ σ_1 در آورده می‌شود، و ماتریس‌های قطریِ σ_3' و ρ_3' بدونِ تغییر می‌مانند.

حال اگر ρ_1' را به شکلِ (13) بیان کنیم، و از این شرط که با $\sigma_1' = \sigma_1$ و $\sigma_3' = \sigma_3$ جابه‌جا و با $\rho_3' = \rho_3$ پادجابه‌جا می‌شود استفاده کنیم، می‌بینیم که باید به شکلِ زیر باشد

$$\rho_1' = c_1'\rho_1 + c_2'\rho_2.$$

شرطِ ${\rho_1'}^2 = 1$ نشان می‌دهد ${c_1'}^2 + {c_2'}^2 = 1$، یا $c_2' = \sin\theta$ و $c_1' = \cos\theta$. در این صورت ρ_1' به شکلِ زیر است

$$\rho_1' = \left\{ \begin{array}{cccc} 0 & 0 & e^{-i\theta} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e^{-i\theta} \\ e^{i\theta} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\theta} & 0 & 0 \end{array} \right\}$$

حال اگر تبدیلاتِ کانونی را اعمال کنیم: سطرِ اوّل و دوّم در $e^{i\theta}$ ضرب می‌شود، و ستونِ اوّل و دوّم به آن تقسیم می‌شود، و ρ_1' به شکلِ ρ_1 درمی‌آید، بدونِ این که σ_1 و σ_2 و ρ_3 عوض شوند. و حالا، بر اساسِ رابطه‌های $i\rho_2' = \rho_3'\rho_1'$ و $i\sigma_2' = \sigma_3'\sigma_1'$، ρ_2' و σ_2' باید به شکلِ ρ_2 و σ_2 باشند.

پس با توالی‌ئی از تبدیلاتِ کانونی، که ترکیب شان یک تبدیلِ کانونی را می‌سازد، ρ' ها و σ' ها به شکلِ ρ ها و σ ها درمی‌آیند. به این ترتیب معادله‌موجِ جدیدِ (12) به شکلِ اصلیِ آن (11) یا (9) درمی‌آید، پس نتایجی که از معادله‌های موجِ اصلی به دست می‌آید مستقل از چهارچوبِ مرجعِ به‌کاررفته است.

§ 4. همیلتونی، برا ی ِ میدانی دل‌خواه.

برای به دست آوردنِ همیلتونیِ یک الکترون در میدانِ الکترومغناطیسی با میدانِ اسکالرِ A_0 و میدانِ برداری ِ $\mathbf{A}$، فرآیندِ معمولِ جایگزینیِ $p_0 + e/c\,.\,\mathrm{A}_0$ به جای ِ p_0، و $\mathbf{p} + e/c\,.\,\mathbf{A}$ به جای ِ $\mathbf{p}$، در همیلتونیِ بدونِ میدان را به کار می‌بریم. به این ترتیب از معادله‌ی (9) به دست می‌آوریم

$$\left[p_0 + \frac{e}{c}\mathrm{A}_0 + \rho_1\left(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + \frac{e}{c}\mathbf{A}\right) + \rho_3 mc\right]\ \psi = 0. \tag{14}$$

به نظر می‌رسد این معادله‌موج برای به حساب آوردنِ تمامِ پدیده‌های دولایه‌گی کافی است. با احتسابِ این که ماتریس‌های ρ و σ چهار سطر و ستون دارند، جواب‌های معادله‌ی بالا چهار برابرِ معادله‌ی غیرِ نسبیتیِ قبلیِ (1) است. از آن جا که نصفِ حل‌ها به خاطرِ این که به الکترونی با بارِ $+e$ مربوط اند کنار گذاشته می‌شوند، تعدادِ باقی‌مانده‌ی حل‌ها برای توجیهِ پدیده‌ی دولایه‌گی درست می‌شود. اثباتی که در بحثِ گذشته برای ناوردائی تحتِ تبدیلِ لورنتس آورده شد به همان شکل برای معادله‌موجِ کلی‌ترِ (14) نیز قابلِ اعمال است.

می‌توانیم تصویرِ اوّلیه‌ای از این که چگونه رابطه‌ی (14) با معادله‌موجِ نسبیتیِ قبلیِ (1) فرق می کند را با ضربِ آن همان طور که با معادله‌ی (5) کردیم ببینیم. این، با جاگذاریِ e' به جای e/c، می‌دهد

$$\begin{aligned}
&= [-(p_0 + e'\mathrm{A}_0) + \rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + e'\mathbf{A}) + \rho_3 mc] \\
&\qquad \times [(p_0 + e'\mathrm{A}_0) + \rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + e'\mathbf{A}) + \rho_3 mc]\,\psi \\
&= [-(p_0 + e'\mathrm{A}_0)^2 + (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + e'\mathbf{A})^2 + m^2c^2 \\
&\qquad + \rho_1\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + e'\mathbf{A})(p_0 + e'\mathrm{A}_0) - (p_0 + e'\mathrm{A}_0)(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + e'\mathbf{A})\}]\ \psi. \qquad (15)
\end{aligned}$$

حالا از رابطه‌ی عمومی برای دو بردارِ دل‌خواهِ $\mathbf{B}$ و $\mathbf{C}$ که با $\boldsymbol{\sigma}$ جابه‌جا می‌شوند استفاده می‌کنیم

$$\begin{aligned}
(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{B})(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{C}) &= \sum \sigma_1^2\,\mathrm{B}_1\,\mathrm{C}_1 + \sum(\sigma_1\sigma_2\mathrm{B}_1\mathrm{C}_2 + \sigma_2\sigma_1\mathrm{B}_2\mathrm{C}_1) \\
&= (\mathbf{B},\ \mathbf{C}) + i\ \Sigma\sigma_3\ (\mathrm{B}_1\mathrm{C}_2 - \mathrm{B}_2\mathrm{C}_1)
\end{aligned}$$

$$= \quad (\mathbf{B},\ \mathbf{C}) + i\ (\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{B}\times\mathbf{C}). \tag{16}$$

با $\mathbf{B} = \mathbf{C} = \mathbf{p} + e'\mathbf{A}$ پیدا می‌کنیم

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + e'\mathbf{A})^2 &= (\mathbf{p} + e'\mathbf{A})^2 + i\ \Sigma\ \sigma_3 \\ &\qquad [(p_1 + e'\mathrm{A}_1)(p_2 + e'\mathrm{A}_2) - (p_2 + e'\mathrm{A}_2)(p_1 + e'\mathrm{A}_1)] \\ &= (\mathbf{p} + e'\mathbf{A})^2 + \hbar e'(\boldsymbol{\sigma},\ \mathrm{curl}\mathbf{A}).\end{aligned}$$

به این ترتیب (15) می‌شود

$$\begin{aligned}0 = \Big[&-(p_0 + e'\mathrm{A}_0)^2 + (\mathbf{p} + e'\mathbf{A})^2 + m^2c^2 + e'\hbar(\boldsymbol{\sigma},\ \mathrm{curl}\mathbf{A}) \\ &\qquad -ie'\hbar\rho_1\Big(\boldsymbol{\sigma}, \mathrm{grad}\ \mathrm{A}_0 + \frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\Big)\Big]\psi \\ = [&-(p_0 + e'\mathrm{A}_0)^2 + (\mathbf{p} + e'\mathbf{A})^2 + m^2c^2 + e'\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{H}) + ie'\hbar\rho_1(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{E})]\psi,\end{aligned}$$

که در آن $\mathbf{E}$ و $\mathbf{H}$ بردارهایِ میدان‌هایِ الکتریکی و مغناطیسی هستند.
عبارتِ بالا با (1) در دو عبارتِ اضافیِ

$$\frac{e\hbar}{c}(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{H}) + \frac{ie\hbar}{c}\rho_1(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{H})$$

در F متفاوت است. این دو عبارت، وقتی به $2\,m$ تقسیم شوند، می‌تواند به عنوانِ انرژیِ پتانسیلِ اضافیِ الکترون به خاطرِ درجاتِ آزادیِ جدید تلقی شود. پس الکترون طوری رفتار می‌کند انگار که گشتاورِ مغناطیسیِ $e\hbar/2mc\,.\,\boldsymbol{\sigma}$ و گشتاورِ الکتریکیِ $ie\hbar/2mc\,.\,\rho_1\boldsymbol{\sigma}$ دارد. این گشتاورِ مغناطیسی همان چیزی است که در مدلِ الکترونِ چرخان فرض می‌شود. گشتاورِ الکتریکی، که موهومیِ محض است، چیزی است که نباید انتظارش را داشته باشیم. این که آیا گشتاورِ الکتریکی معنیِ فیزیکی دارد موردِ شک است، زیرا همیلتونی‌یِ (14) که از آن شروع کردیم حقیقی است، و قسمتِ موهومی تنها وقتی ظاهر می‌شود که آن را به نحو ی ساختگی [در مزدوج اش] ضرب می‌کنیم تا به شکلی که یادآورِ همیلتونی‌های نظریه‌های قبلی است در آید.

§ 5. انتگرال‌های تکانه‌ی زاویه‌ای برای حرکت در یک میدانِ مرکزی.

حال حرکتِ یک الکترون را در میدانِ نیروی مرکزی با تفصیلی بیش‌تر بررسی می‌کنیم. قرار می‌دهیم $\mathbf{A} = 0$ و $e'\mathrm{A}_0 = \mathrm{V}(r)$، که یک تابعِ دل‌خواه از شعاعِ r است، بنا بر این

همیلتونیِ (14) می‌شود

$$\mathrm{F} \equiv p_0 + \mathrm{V} + \rho_1(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p}) + \rho_3\, mc.$$

حل‌های تناوبیِ معادله‌موجِ $\mathrm{F}\psi = 0$ را تعیین خواهیم کرد، که در آن‌ها p_0 به جای یک عمل‌گر به عنوانِ یک پارامتر در نظر گرفته می‌شود؛ این [p_0] در واقع $1/c$ برابرِ تراز ِ انرژی است.

ابتدا انتگرال‌های تکانه‌یِ زاویه‌ایِ حرکت را خواهیم یافت. تکانه‌ی زاویه‌ایِ مداریِ $\mathbf{m}$ به شکلِ زیر تعریف می‌شود

$$\mathbf{m} = \mathbf{x} \times \mathbf{p},$$

که روابطِ جابه‌جایی یِ زیر را برآورده می‌کند

$$\left.\begin{array}{ll} m_1x_1 - x_1m_1 = 0, & m_1x_2 - x_2m_1 = ihx_3 \\ m_1p_1 - p_1m_1 = 0, & m_1p_2 - p_2m_1 = ihp_3 \\ \mathbf{m}\times\mathbf{m} = i\hbar\mathbf{m}, & \mathbf{m}^2m_1 - m_1\mathbf{m}^2 = 0, \end{array}\right\}, \tag{17}$$

به همراهِ روابطی که از جای‌گشتِ شاخص‌ها به دست می‌آیند. هم‌چنین $\mathbf{m}$ با r، و با تکانه‌ی مزدوجش p_r جابه‌جا می‌شود.

داریم

$$\begin{aligned} m_1\mathrm{F} - \mathrm{F}m_1 &= \rho_1\{m_1(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p}) - (\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p})m_1\} \\ &= \rho_1(\boldsymbol{\sigma},\ m_1\mathbf{p} - \mathbf{p}m_1) \\ &= i\hbar\rho_1(\sigma_2p_3 - \sigma_3p_2) \end{aligned}$$

و بنا بر این

$$\mathbf{m}\mathrm{F} - \mathrm{F}\mathbf{m} = i\hbar\rho_1\ \boldsymbol{\sigma}\times\mathbf{p}. \tag{18}$$

در نتیجه $\mathbf{m}$ یک ثابتِ حرکت نیست. به علاوه، با کمکِ (8) داریم

$$\begin{aligned} \sigma_1\mathrm{F} - \mathrm{F}\sigma_1 &= \rho_1\big\{\sigma_1(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p}) - (\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p})\sigma_1\big\} \\ &= \rho_1(\sigma_1\boldsymbol{\sigma} - \boldsymbol{\sigma}\sigma_1,\ \mathbf{p}) \\ &= 2\,i\,\rho_1\ (\sigma_3p_2 - \sigma_2p_3), \end{aligned}$$

و بنا بر این

$$\boldsymbol{\sigma}\,\mathrm{F} - \mathrm{F}\,\boldsymbol{\sigma} = -2\,i\,\rho_1\;\boldsymbol{\sigma}\times\mathbf{p}$$

از این رو

$$(\mathbf{m} + \tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma})\;\mathrm{F} - \mathrm{F}(\mathbf{m} + \tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}) = 0.$$

به این ترتیب $\mathbf{m} + \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$ (که مثلاً آن را $\mathbf{M}$ می‌نامیم) یک ثابتِ حرکت است. می‌توانیم این نتیجه را چنین تعبیر کنیم که بگوییم الکترون یک تکانه‌یِ زاویه‌ایِ اسپینی $\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$ دارد، که به تکانه‌یِ زاویه‌ایِ مداریِ $\mathbf{m}$ِ آن اضافه می‌شود، و تکانه‌یِ زاویه‌ایِ کلِ $\mathbf{M}$ را می‌دهد که ثابتِ حرکت است.

روابطِ جابه‌جاییِ (17) تماماً با جاگذاریِ m ها با M ها برقرارند. به طورِ خاص

$$\mathbf{M}\times\mathbf{M} = i\hbar\mathbf{M} \qquad \text{و} \qquad \mathbf{M}^2\,\mathrm{M}_3 = \mathrm{M}_3\,\mathbf{M}^2.$$

M_3 یک متغیر کنشِ سیستم است. چون مقدارمشخصه‌هایِ m_3 باید مضاربِ صحیحی از $\hbar$ باشند تا تابعِ موج تک‌مقدار باشد، مقدارمشخصه‌هایِ M_3 باید مضاربِ فردِ $\frac{\hbar}{2}$ باشند. اگر قرار دهیم

$$\mathbf{M}^2 = \left(j^2 - \tfrac{1}{4}\right)\hbar^2, \tag{19}$$

j عددِ کوانتمیِ دیگری خواهد بود، و مقدارمشخصه‌هایِ M_3 در گستره‌یِ $(j-\frac{1}{2})\hbar$ تا $(j+\frac{1}{2})\hbar$ خواهند بود [7]. به این ترتیب j مقدارها یِ صحیح می‌گیرد.

به ساده‌گی از (18) می‌توان دید که $\mathbf{m}^2$ با F جابه‌جا نمی‌شود، و بنا بر این ثابتِ حرکت نیست. این بینِ نظریه‌ی حاضر و نظریه‌ی قبلیِ الکترونِ چرخان، که در آن $\mathbf{m}^2$ ثابت است، و عددِ کوانتومیِ سمتیِ k را با رابطه‌ای مانندِ (19) تعریف می‌کند فرق می‌گذارد. خواهیم دید که j در واقع نقشِ k در نظریه‌ی قبلی را بازی می‌کند.

§ 6. ترازهایِ انرژی برایِ حرکت در یک میدانِ مرکزی.

حالا معادله‌ی موج را به شکلِ معادله‌یِ دیفرانسیلی در r به دست می‌آوریم که در آن متغیرهائی که جهت‌گیریِ سیستم را مشخص می‌کنند حذف شده‌اند. این کار را می‌توانیم تنها با استفاده از جبر ناجابه‌جائی مقدماتی به روشی که می‌آید انجام دهیم.

در رابطه‌ی (16) بگیرید $\mathbf{B} = \mathbf{C} = \mathbf{m}$. خواهیم داشت

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})^2 &= \mathbf{m}^2 + i(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m} \times \mathbf{m}) \\ &= (\mathbf{m} + \tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma})^2 - \hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) - \tfrac{1}{4}\hbar^2\boldsymbol{\sigma}^2 - \hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) \\ &= = \mathbf{M}^2 - 2\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) - \tfrac{3}{4}\hbar^2. \end{aligned} \tag{20}$$

از این رو

$$\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) + \hbar\}^2 = \mathbf{M}^2 + \tfrac{1}{4}\hbar^2 = j^2\hbar^2.$$

تا این جا j را فقط از راهِ j^2 تعریف کردیم، و حالا، اگر بخواهیم، می‌توانیم $j\hbar$ را برابرِ $(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) + \hbar$ بگیریم. این مناسب نیست زیرا می‌خواهیم j یک ثابتِ حرکت باشد در حالی که $(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) + \hbar$ ثابتِ حرکت نیست، اگر چه مربع‌اش هست. در واقع، با کاربردِ دیگری از (16) داریم،

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) = i(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m} \times \mathbf{p}),$$

از آن جا که $(\mathbf{m},\ \mathbf{p}) = 0$، و به طورِ مشابه

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) = i(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} \times \mathbf{m}),$$

پس

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) + (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) &= i\sum \sigma_1\ (m_2p_3 - m_3p_2 + p_2m_3 - p_3m_2) \\ &= i\sum \sigma_1\ .\ 2i\hbar p_1 = -2\hbar(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})\end{aligned}$$

یا

$$\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) + \hbar\}\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) + (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})\ \{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) + \hbar\} = 0.$$

پس $(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) + \hbar$ با یکی از جملاتِ F، که $\rho_1\ (\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{p})$ باشد، پادجابه‌جا، و با دیگران جابه‌جا می‌شود. از این رو $\rho_3\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) + \hbar\}$ با همه‌ی چهار جمله جابه‌جا می‌شود، و در نتیجه ثابتِ حرکت است. امّا مربعِ $\rho_3\ \{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) + \hbar\}$ هم باید برابرِ $j^2\,\hbar^2$ باشد. پس می‌گیریم

$$j\hbar = \rho_3\{(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) + \hbar\}. \tag{21}$$

با کاربردِ دیگری از (16) داریم:

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) = (\mathbf{x},\ \mathbf{p}) + i\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}).$$

اکنون، یک تعریفِ مجاز از p_r هست

$$(\mathbf{x},\ \mathbf{p}) = rp_r + i\hbar,$$

و از (21)

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) = \rho_3 j\hbar - \hbar.$$

پس

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) = rp_r + i\rho_3 j\hbar. \tag{22}$$

کمیّتِ ε را معرفی می‌کنیم، با این تعریف:

$$r\varepsilon = \rho_1\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}). \tag{23}$$

چون r با ρ_1 و $(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{x})$ جابه‌جا می‌شود، با ε هم می‌شود. پس داریم

$$r^2\varepsilon^2 = [\rho_1\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})]^2 = (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})^2 = \mathbf{x}^2 = r^2$$

یا

$$\varepsilon^2 = 1.$$

چون، تا جائی که به تکانه‌زاویه‌ای مربوط است، بینِ $\mathbf{x}$ و $\mathbf{p}$ تقارن هست، $\rho_1\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})$، مانندِ $\rho_1\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p})$، ε باید با $\mathbf{M}$ و j جابه‌جا شود. به علاوه، ε باید با p_r جابه‌جاشود، چون داریم

$$(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})\ (\mathbf{x},\ \mathbf{p}) - (\mathbf{x},\ \mathbf{p})\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) = i\hbar\ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}),$$

که می‌دهد

$$r\varepsilon\ (rp_r + i\hbar) - (rp_r + i\hbar)\ r\varepsilon = i\hbar r\varepsilon,$$

که می‌رسد به

$$\varepsilon p_r - p_r \varepsilon = 0.$$

حال از (22) و (23) داریم

$$r\varepsilon\rho_1 \ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) = rp_r + i\rho_3 j\hbar$$

یا

$$\rho_1 \ (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p}) = \varepsilon p_r + i\varepsilon\rho_3 j\hbar/r.$$

به این ترتیب

$$\mathrm{F} = p_0 + \mathrm{V} + \varepsilon p_r + i\varepsilon\rho_3 j\hbar/r + \rho_3 mc. \tag{24}$$

معادله‌ی (23) نشان می‌دهد که ε با ρ_3 پادجابه‌جا می‌شود. پس می‌توانیم با یک تبدیلِ کانونی (که شاید شاملِ x ها و p ها و هم چنین σ ها و ρ ها هم باشد) ε را به شکلِ ρ_2 در § 2 در آوریم، بی آن که ρ_3 و تمامِ متغیرهائی که در طرفِ راستِ (24) آمده اند تغییر کنند، [این ممکن است] زیرا تمامِ این متغیرها با ε جابه‌جا می‌شوند. حالا $i\varepsilon\rho_3$ به شکلِ $i\rho_2\rho_3 = -\rho_1$ خواهد شد، و بنا بر این معادله‌موج به شکلِ زیر در می آید

$$\mathrm{F}\psi \equiv [p_0 + \mathrm{V} + \rho_2 p_r - \rho_1 j\hbar/r + \rho_3 mc] \ \psi = 0.$$

اگر این معادله را کامل بنویسیم، و مؤلفه‌هایِ متناظر با ستون‌ها (یا سطرها) یِ اوّل و سوّم را به ترتیب ψ_α و ψ_β بنامیم، خواهیم داشت

$$(\mathrm{F}\psi)_\alpha \equiv (p_0 + \mathrm{V}) \ \psi_\alpha - \hbar\frac{\partial}{\partial r}\psi_\beta - \frac{j\hbar}{r}\psi_\beta + mc\psi_\alpha = 0,$$
$$(\mathrm{F}\psi)_\beta \equiv (p_0 + \mathrm{V}) \ \psi_\beta + \hbar\frac{\partial}{\partial r}\psi_\alpha - \frac{j\hbar}{r}\psi_\alpha - mc\psi_\beta = 0.$$

مؤلفه‌ها یِ دوّم و چهارم تکرارِ همین معادله‌ها را می‌دهند. حالا ψ_α را حذف می‌کنیم. اگر $\hbar\mathrm{B}$ را به جایِ $p_0 + \mathrm{V} + mc$ بگذاریم، معادله‌ی اول می شود

$$\left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{j}{r}\right)\psi_\beta = \mathrm{B}\psi_\alpha$$

که با مشتق‌گیری می‌دهد

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi_\beta+\frac{j}{r}\frac{\partial}{\partial r}\psi_\beta-\frac{j}{r^2}\psi_\beta &= \mathrm{B}\frac{\partial}{\partial r}\psi_\alpha+\frac{\partial \mathrm{B}}{\partial r}\psi_\alpha\\ &= \frac{\mathrm{B}}{\hbar}\Big[-(p_0+\mathrm{V}-mc)\ \psi_\beta+\frac{j\hbar}{r}\ \psi_\alpha\Big]+\frac{1}{\hbar}\frac{\partial \mathrm{V}}{\partial r}\ \psi_\alpha\\ &= -\frac{(p_0+\mathrm{V})^2-m^2c^2}{\hbar^2}\ \psi_\beta+\Big(\frac{j}{r}+\frac{1}{\mathrm{B}\hbar}\frac{\partial \mathrm{V}}{\partial r}\Big)\Big(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{j}{r}\Big)\ \psi_\beta.\end{aligned}$$

این می‌رسد به

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}\psi_\beta+\left[\frac{(p_0+\mathrm{V})^2-m^2c^2}{\hbar^2}-\frac{j(j+1)}{r^2}\right]\ \psi_\beta-\frac{1}{\mathrm{B}\hbar}\frac{\partial \mathrm{V}}{\partial r}\Big(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{j}{r}\Big)\ \psi_\beta=0. \quad (25)$$

مقدارهای ِ پارامتر ِ p_0 که برای ِ آن‌ها این معادله حل‌هائی دارد که در $r=0$ و $r=\infty$ متناهی اند، برابر اند با $1/c$ ِ ترازهای ِ انرژی ِ سیستم. برای ِ مقایسه‌ی این معادله با معادله‌های ِ نظریه‌های ِ قبلی قرار می‌دهیم $\psi_\beta=r\chi$، به این ترتیب

$$\frac{\partial^2}{\partial r^2}\chi+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\chi+\left[\frac{(p_0+\mathrm{V})^2-m^2c^2}{\hbar^2}-\frac{j(j+1)}{r^2}\right]\chi-\frac{1}{\mathrm{B}\hbar}\frac{\partial \mathrm{V}}{\partial r}\Big(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{j}{r}\Big)\chi=0. \quad (26)$$

اگر از آخرین جمله صرف‌نظر کنیم، که به علّت ِ بزرگی ِ B کوچک است، این معادله معادله‌ی شرودینگر ِ معمولی برای ِ این سیستم می‌شود، که تصحیحات ِ نسبیتی را هم در خود دارد. از آن جائی که j، بنا به تعریف، هر دو مقدار ِ مثبت و منفی ِ صحیح ِ مقدارمشخصه‌ها را می‌گیرد، معادله‌ی ما، اگر از جمله‌ی آخر صرف ِ نظر نشود، تعداد ترازهای ِ انرژی را دو برابر می‌دهد.

حال جمله‌ی آخر ِ معادله‌ی (26) را، که از همان مرتبه‌ی بزرگی ِ تصحیحات ِ نسبیتی است، با تصحیح ِ اسپینی‌ای که داروین و پائولی داده اند مقایسه می‌کنیم. برای ِ این کار باید جمله‌ی $\partial\chi/\partial r$ را با یک تبدیل ِ اضافی ِ تابع ِ موج حذف کنیم. می‌گذاریم

$$\chi=\mathrm{B}^{-\frac{1}{2}}\chi_1,$$

که می‌دهد

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\chi_1+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\chi_1+\left[\frac{(p_0+\mathrm{V})^2-m^2c^2}{\hbar^2}-\frac{j(j+1)}{r^2}\right]\chi_1\\ +\left[\frac{1}{\mathrm{B}\hbar}\frac{j}{r}\frac{\partial \mathrm{V}}{\partial r}-\frac{1}{2}\frac{1}{\mathrm{B}\hbar}\frac{\partial^2 \mathrm{V}}{\partial r^2}+\frac{1}{4}\frac{1}{\mathrm{B}^2\hbar^2}\Big(\frac{\partial \mathrm{V}}{\partial r}\Big)^2\right]\chi_1=0. \qquad (27)\end{aligned}$$

تا مرتبه‌ی اول ِ دقت، این تصحیح می‌دهد

$$\frac{1}{\mathrm{B}\hbar}\Big(\frac{j}{r}\frac{\partial \mathrm{V}}{\partial r}-\frac{1}{2}\frac{\partial^2 \mathrm{V}}{\partial r^2}\Big)$$

که در آن، (اگر p_0 مثبت باشد) $\mathrm{B}\hbar = 2mc$ است. برای اتم ِ هیدروژن باید قرار دهیم $\mathrm{V} = e^2/cr$. تصحیح ِ مرتبه‌ی اول می‌شود

$$-\frac{e^2}{2mc^2r^3}(j+1). \tag{28}$$

اگر در (27) به جای ِ $j+1$ بگذاریم $-j$، تغییری در جمله‌ای که نمایاننده‌ی سیستم مختل‌نشده است نداده‌ایم، پس

$$\frac{e^2}{2mc^2r^3}j \tag{28'}$$

تصحیح ِ ممکن ِ دیگری برای ِ همان سیستم مختل‌نشده می‌دهد.

در نظریه‌ی پائولی و داروین، بعد از این‌که ضریب ِ $\frac{1}{2}$ توماس وارد شد، جمله‌ی متناظر تصحیح می‌شود

$$\frac{e^2}{2m\hbar c^2r^3}(\boldsymbol{\sigma},\ \mathbf{m})$$

باید به خاطر داشته باشیم که در نظریه‌ی پائولی—داروین، تکانه‌زاویه‌ای ِ برآیند ِ k نقش ِ قسمتی از j را بازی می‌کند. ما باید k را، در عوض ِ مانسته‌ی دقیق‌اش (19)، با

$$\mathbf{m}^2 = k(k+1)\ \hbar^2$$

تعریف کنیم، تا بتواند مانند ِ j مقدارمشخصه‌های ِ صحیح بگیرد. از (20) داریم

$$(\boldsymbol{\sigma},\mathbf{m})^2 = k(k+1)\ \hbar^2 - \hbar\ (\boldsymbol{\sigma},\mathbf{m})$$

یا

$$\{(\boldsymbol{\sigma},\mathbf{m})+\frac{1}{2}\hbar\}^2 = (k+\frac{1}{2})^2\hbar^2,$$

از این رو

$$(\boldsymbol{\sigma},\mathbf{m}) = \ k\hbar \quad \text{یا} \quad -(k+1)\hbar.$$

به این ترتیب تصحیح می‌شود

$$\frac{e^2}{2mc^2r^3}k \quad \text{یا} \quad -\frac{e^2}{2mc^2r^3}(k+1)$$

که با (28) و (28′) هم‌خوانی دارد. به این ترتیب نظریه‌ی کنونی، در اولین تقریب، همان ترازهای ِ انرژی ِ به دست آمده توسط ِ داروین و پائولی را که با آزمایش موافقت دارد می‌دهد.

مراجع

1. Pauli, ‘Z. f. Physik,’ vol. 43, p. 601 (1927)
2. Darwin, ‘Roy. Soc. Proc.,’ A, vol. 116, p. 227 (1927)
3. Gordon, ‘ Z. f. Physik,’ vol. 40, p.117 (1926)
4. Klein, ‘ Z. f. Physik,’ vol. 41, p. 407 (1927)
5. Jordan, ‘ Z. f. Physik,’ vol. 40, p. 809 (1927); Dirac, ‘Roy. Soc. Proc.,’ A, vol. 113, p. 621 (1927)
6. Pauli, *loc. cit.*
7. ‘Roy. Soc. Proc.,’ A, vol.111, p. 281 (1928)