نظریه‌ی ـ کوانتومی ـ الکترون. قسمت ـ II[1]

پی. اِی. اِم. دیراک

کالج ِ سنت‌جان، کمبریج.

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

در مقاله‌ی قبلی از نویسنده[2] نشان داده شد که نظریه‌ی عمومی ـ مکانیک‌کوانتومی به هم‌راه ـ نسبیت اقتضا می‌کند که معادله‌موج ِ یک الکترون که در میدان ـ دل‌خواه ـ الکترومغناطیسی ناشی از پتانسیل‌های ـ A_0، A_1، A_2 و A_3 حرکت می‌کند به شکل ـ زیر باشد

$$\begin{aligned} F\psi \equiv \Big[p_0 + \frac{e}{c}A_0 + \alpha_1\Big(p_1 + \frac{e}{c}A_1\Big) + \alpha_2\Big(p_2 + \frac{e}{c}A_2\Big) \\ +\alpha_3\Big(p_3 + \frac{e}{c}A_3\Big) + \alpha_4 mc\Big]\psi = 0. \end{aligned} \tag{1}$$

α ها متغیرهای ـ دینامیکی ـ جدیدی هست‌اند که برای ـ برآوردن ـ شرط‌های ـ مسئله باید معرفی شوند. آن‌ها را ممکن است به عنوان ـ توصیف‌گر ِ یک حرکت ـ درونی برای ـ الکترون تعبیر کرد، که برای ـ بسیاری از مقاصد ممکن است اسپین ـ الکترون که در نظریه‌های ـ قبلی فرض شده است گرفته شود. ما آن‌ها را متغیرهای ـ اسپینی می‌نامیم.

α ها باید شرط‌های ـ زیر را برآورده کنند

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

آن‌ها ممکن است به ساده‌گی برحسب ـ شش متغیر ِ ρ_1، ρ_2، ρ_3، σ_1، σ_2، و σ_3 بیان شوند که رابطه‌های ـ

[1] این مقاله ترجمه‌ای است از:
P. A. M. Dirac, "*The Quantum Theory of Electron. Part II.*", Proceedings of the Royal Society of London A, Vol. 118, No. 779 (Mar. 1, 1928), 351-361.

مترجم: امیرحسین فتح‌اللهی.

[2] 'Roy. Soc. Proc.,' A, vol. 117, p. 610 (1928). این مقاله در ادامه " پیشین " نامیده می‌شود. [ترجمه‌ی این مقاله در شماره‌ی 19 از گاما آمده است.]

$$\left.\begin{array}{l} \rho_r^2 = 1, \quad \sigma_r^2 = 1, \quad \rho_r\sigma_s = \sigma_s\rho_r, \quad (r,s=1,2,3) \\ \qquad\qquad\qquad\qquad \text{و} \\ \rho_1\rho_2 = i\rho_3 = -\rho_2\rho_1, \qquad \sigma_1\sigma_2 = i\sigma_3 = -\sigma_2\sigma_1 \end{array}\right\}, \tag{2}$$

و شبیه‌شان را که از جای‌گشت ِ شاخص‌ها به دست می‌آیند برآورده می‌کنند. در این صورت داریم

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

متغیرهای ِ σ_1، σ_2 و σ_3 سه مولفه‌ی یک بردار را تشکیل می‌دهند، که (جدای ِ یک مضرب ِ ثابت) با بردار ِ تکانه‌زاویه‌ای ِ اسپین که در نظریه‌ی ِ الکترون ِ اسپین‌دار ِ پائولی ظاهر می‌شود مطابقت می‌کند. ρ ها و σ ها، مانند ِ هر متغیر ِ دینامیکی ِ دیگر، با زمان تغییر می‌کنند. معادله‌حرکت‌های ِ آن‌ها، در نمادگذاری ِ براکت ِ پوآسون ِ [ ] می‌شود

$$\dot\rho_r = c\,[\rho_r, \mathrm{F}], \qquad \dot\sigma_r = c\,[\sigma_r, \mathrm{F}].$$

باید توجه شود که این معادله‌حرکت‌ها با شروط ِ (2) سازگاراند، به طوری که اگر در اول شروط برآورده شوند، هم‌واره برقرار می‌مانند. برای مثال داریم

$$i\hbar/c\,.\,\dot\sigma_1 = \sigma_1\mathrm{F} - \mathrm{F}\sigma_1 = 2i\rho_1\sigma_3(p_2 + e/c\,.\,\mathrm{A}_2) - 2i\rho_1\sigma_2(p_3 + e/c\,.\,\mathrm{A}_3).$$

بنابراین $\dot\sigma_1$ و σ_1 پادجابه‌جا می‌شوند، چنان که

$$d\sigma_1^2/dt = \dot\sigma_1\sigma_1 + \sigma_1\dot\sigma_1 = 0.$$

ρ ها و σ ها، و بنابراین هر تابعی از آن‌ها، بر حسب ِ ماتریس‌هایی با چهار سطر و ستون قابل ِ بیان هست‌اند. یک نمایش ِ ممکن، که در آن‌ها ρ_3 و σ_3 قطری هست‌اند، در § 2 از پیشین داده شده است. چنین نمایشی فقط در یک تک لحظه قابل ِ اعمال است، زیرا ρ ها و σ ها با زمان تغییر می‌کنند. برای به دست آوردن ِ طرحی از نمایش که برای همه‌ی زمان‌ها برقرار باشد، چنان که معادله‌حرکت‌ها در آن معتبر باشد، باید ثابت‌حرکت‌ها را به شکل ِ ماتریس‌های ِ قطری داشته باشیم. به هر حال، تا جائی که به حل ِ معادله‌موج ِ (1) مربوط است، کاملاً صحیح است که یک نمایش برای ρ ها و σ ها

بگیریم که برای یک تک لحظه برقرار باشد (همان‌طور که در پیشین انجام شد)، زیرا، همان‌طور که از تعبیرِ عمومیِ مکانیک‌کوانتومی برمی‌آید، تابع‌موج تابعِ تبدیلاتی است که ρ ها، σ ها و x هایِ این لحظه‌ی خاص را به متغیرهائی که ثابت‌حرکت هست‌اند مربوط می‌کنند.

قبل از آن که با نظریه‌ی اتم‌هایِ تک‌الکترونی که در پیشین شروع شد ادامه دهیم، اثباتی از قانون بقا ارائه می‌کنم که می‌گوید، تغییرِ احتمالِ حضورِ یک الکترون در حجم و زمانِ داده شده برابر است با احتمالِ عبورِ آن از مرز. این اثبات مکملِ کارِ § 3 از پیشین است، و برای این که بتوان نتیجه گرفت که این نظریه نتایجِ سازگاری می‌دهد که تحتِ تبدیلاتِ لورنتس ناورداست ضروری است.

§ 1. قانونِ بقا.

ابتدا یک تعمیمِ جزئی در تعبیرِ معمول از مکانیک‌موجی را به حالت‌هائی که در آن همیلتونی ناهرمیتی است اعمال می‌کنیم. معادله‌موج را که بر حسبِ متغیرهایِ خاصِ q نوشته شده است را بگیرید

$$(\mathrm{H} - \mathrm{W})\psi = 0. \tag{i}$$

هم‌چنین معادله‌ی

$$(\tilde{\mathrm{H}} - \tilde{\mathrm{W}})\phi = 0$$

یا

$$(\tilde{\mathrm{H}} + \mathrm{W})\phi = 0, \tag{ii}$$

را در نظر بگیرید که در آن $\tilde{a}$ ماتریسی را نشان می‌دهد که از ترانهاده کردنِ ماتریسِ a به دست می‌آید. اگر ψ_m و ϕ_n به ترتیب حل‌هایِ به طرزِ مناسبی بهنجارشده از (i) و (ii) باشند، که منتسب به حالت‌هایِ m و n هست‌اند، $\phi_n\psi_m$ را عنصرِ ماتریسیِ متناظر با احتمالِ این که q مقدارِ خاصی را اختیار کند می‌گیریم. اگر H هرمیتی باشد، $\tilde{\mathrm{H}}$ مزدوج‌مختلطِ H است (که از تبدیلِ i به $-i$ به دست می‌آید) و حل‌هایِ (ii) صرفاً مزدوج‌مختلطِ حل‌هایِ (i) هست‌اند، چنان که در این حالت احتمالِ $\phi_n\psi_m$ شکلِ معمولِ $\bar{\psi}_n\psi_m$ می‌شود. در حالتِ کلی در (ii) باید از همیلتونیِ ترانهاده‌شده به جایِ

همیلتونیِ مزدوج‌مختلط شده استفاده کرد تا بتوان مطمئن بود که اگر ϕ_n و ψ_m یک بار متعامد یا جفتی بهنجار شدند (یعنی $\int \phi_n\psi_m dq = 1$)، همواره متعامد یا بهنجار می‌مانند.

برای یک الکترون در میدانِ الکترومغناطیسی، معادله‌موجِ ما این است

$$[p_0 + e'\mathrm{A}_0 + \rho_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + e'\mathbf{A}) + \rho_3 mc]\psi = 0 \tag{3}$$

که در آن $e' = e/c$. در این جا اگر ماتریس‌هایِ متغیرهایِ اسپینی در نمایشی انتخاب شوند که هرمیتی باشند، همیلتونی نیز هرمیتی است. البته در صورتی که تبدیلِ لورنتس به این معادله‌موج اعمال و سپس به ضریبِ p_0ِ جدید تقسیم شود، همیلتونیِ جدید لزوماً هرمیتی نیست، اگرچه، همان طور که در § 3 از پیشین نشان داده شد، می‌توان همیلتونی را به وسیله‌ی یک تبدیلِ کانونی رویِ ماتریس‌هایِ متغیرهایِ اسپینی به شکل هرمیتیِ اصلی‌اش برگرداند. در ادامه تقاضا می‌کنیم که در تمامِ چارچوب‌هایِ مرجع نمایشِ ماتریسیِ یک‌سانی برای متغیرهایِ اسپینی به کار رود، و بنابراین نمی‌توانیم فرض کنیم که همیلتونی هرمیتی است و باید تعمیمِ گفته‌شده در بالا را به کار بریم.

معادله‌ی به دست آمده از ترانهاده کردنِ عمل‌گرِ (3) می‌شود

$$[-p_0 + e'\mathrm{A}_0 + \tilde{\rho}_1(\tilde{\boldsymbol{\sigma}}, -\mathbf{p} + e'\mathbf{A}) + \tilde{\rho}_3 mc]\phi = 0. \tag{4}$$

بنا به فرضِ بالا، احتمالِ حضورِ الکترون در واحدِ حجم در هم‌سایه‌گیِ هر نقطه‌ی داده شده، با $\phi\psi$ داده می‌شود، که در آن این ضرب باید به عنوانِ جمع رویِ ضربِ هر یک از چهار مولفه‌ی ϕ (که به چهار سطر یا ستونِ ماتریس‌هایِ ρ و σ اشاره می‌کند) در مولفه‌هایِ نظیرشان در ψ فهمیده شود. باید ثابت کنیم که این احتمال مولفه‌ی زمانیِ یک 4–بردار با دیورژانسِ صفر است.

از (3)

$$[\rho_3(p_0 + e'\mathrm{A}_0) + \rho_1\rho_3(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{p} + e'\mathbf{A}) + mc]\rho_3\psi = 0$$

یا

$$[\gamma_0(p_0 + e'\mathrm{A}_0) + \Sigma_{r=1,2,3}\gamma_r(p_r + e'A_r) + mc]\chi = 0, \tag{5}$$

که

$$\gamma_0 = \rho_3, \qquad \gamma_r = \rho_1\rho_3\sigma_r, \qquad \chi = \rho_3\psi.$$

معادله‌ی (5) نسبت به چهار بُعدِ فضا و زمان متقارن است، و نشان می‌دهد که γ_0، $-\gamma_1$، $-\gamma_2$ و $-\gamma_3$ مولفه‌هایِ پادوردایِ یک 4—برداراند. اگر (4) را از چپ در $\tilde{\rho}_3$ ضرب کنیم داریم

$$[\tilde{\gamma}_0(-p_0 + e'\mathrm{A}_0) + \Sigma_r\tilde{\gamma}_r(-p_r + e'A_r) + mc]\phi = 0, \tag{6}$$

زیرا

$$\tilde{\gamma}_0 = \rho_3, \qquad \tilde{\gamma}_r = \tilde{\sigma}_r\tilde{\rho}_3\tilde{\rho}_1 = \tilde{\rho}_3\tilde{\sigma}_1\tilde{\rho}_r.$$

عمل‌گر در این معادله صرفاً ترانهاده‌شده‌ی عمل‌گرِ (5) است. اکنون احتمال در واحدِ حجمِ حضورِ الکترون با

$$\phi\psi = \phi\rho_3\chi = \phi\gamma_0\chi, \tag{7}$$

داده می‌شود که در آن $\phi\alpha\chi$ نشان‌دهنده‌ی جمع رویِ ضرب هر مولفه‌ی ϕ در مولفه‌ی نظیرش در $\alpha\chi$ است، که α هر تابع از متغیرهایِ اسپینی است که با یک ماتریس با چهار سطر و ستون نمایش داده می‌شود. [توجه کنید که به طورِ کاملاً کلی داریم $\phi\alpha\chi = \chi\tilde{\alpha}\phi$]. عبارتِ (7) مولفه‌ی زمانیِ یک 4—بردار است که مولفه‌هایِ فضائی‌اش، یعنی

$$-\phi\gamma_1\chi, \qquad -\phi\gamma_2\chi, \qquad -\phi\gamma_3\chi,$$

باید $1/c$ برابرِ احتمال در واحدِ زمان برای عبورِ الکترون از واحدِ سطحِ عمود بر هر یک از سه محور را بدهد.

حال باید نشان دهیم که دیورژانسِ این 4—بردار صفر است، یعنی

$$\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}(\phi\gamma_0\chi) - \Sigma_r\frac{\partial}{\partial x_r}(\phi\gamma_r\chi) = 0. \tag{8}$$

با ضربِ (5) در ϕ و (6) در χ و تفریق آن‌ها داریم

$$\phi[\gamma_0 p_0 + \Sigma_r \gamma_r p_r]\chi + \chi[\tilde{\gamma}_0 p_0 + \Sigma_r \tilde{\gamma}_r p_r]\phi = 0,$$

که می‌دهد

$$\phi\Big[\gamma_0 \frac{\partial}{c\partial t} - \Sigma_r \gamma_r \frac{\partial}{\partial x_r}\Big]\chi + \chi\Big[\tilde{\gamma}_0 \frac{\partial}{c\partial t} - \Sigma_r \tilde{\gamma}_r \frac{\partial}{\partial x_r}\Big]\phi = 0,$$

یا

$$\phi\Big[\gamma_0 \frac{\partial}{c\partial t} - \Sigma_r \gamma_r \frac{\partial}{\partial x_r}\Big]\chi + \frac{1}{c}\frac{\partial \phi}{\partial t}\gamma_0 \chi - \Sigma_r \frac{\partial \phi}{\partial x_r}\gamma_r \chi = 0.$$

از آن جائی که γ ها ماتریس‌های ِ ثابت هست‌اند، این عبارت بلافاصله معادله‌بقای ِ (8) را می‌دهد.

§ 2. اصل ِ انتخاب.

در پیشین عدد ِ کوانتومی ِ j که اندازه‌ی تکانه‌زاویه‌ی ناشی از حرکت ِ یک الکترون ِ در میدان ِ نیروی ِ مرکزی را می‌داد معرفی شد. j می‌تواند هر دو مقدار ِ صحیح ِ مثبت و منفی را اختیار کند. هم‌چنین نشان داده شد که عدد ِ کوانتومی ِ مغناطیسی ِ $u = \mathrm{M}_3/\hbar$، که مولفه‌ی تکانه‌زاویه‌ای ِ کل را در یک راستای ِ مشخص می‌داد، مقادیر ِ نیمه‌صحیح از $-|j| + \frac{1}{2}$ تا $|j| - \frac{1}{2}$ را می‌گیرد. پس حالت ِ $j = 0$ کنار می‌رود، و وزن ِ هر حالت ِ j می‌شود $2|j|$. معادله‌ای که برای تعیین ِ انرژی ِ لایه‌ها به دست آمد، یعنی (25) یا (26)، به غیر از جمله‌ی آخر که که تصحیح ِ ناشی از اسپین را می‌دهد، حاوی ِ j به صورت ِ $j(j+1)$ است. پس دو مقدار ِ j که یک مقدار برای $j(j+1)$ می‌دهند، یعنی $j = j'$ و $j = -(j'+1)$، برای $j' > 0$، یک دوگانه‌ی اسپین را تشکیل می‌دهند. پس ارتباط ِ بین ِ مقدارهای ِ j و نمادگذاری ِ معمول برای ِ طیف ِ قلیائی‌ها با طرح ِ زیر نمایش داده می‌شود:—

$$j = \quad \underset{\mathrm{S}}{-1} \qquad \underbrace{1 \quad -2}_{\mathrm{P}} \qquad \underbrace{2 \quad -3}_{\mathrm{D}} \qquad \underbrace{3 \quad -4}_{\mathrm{F}} \quad \ldots$$

در این نظریه هیچ عدد ِ کوانتومی ِ سمتی ِ k وجود ندارد، و مدار ِ یک الکترون در اتم فقط با سه عدد ِ کوانتومی ِ n، j و u تعریف می‌شود. به این حساب ممکن است انتظار برود که در استخراج ِ معمول ِ قواعد ِ انتخاب، شدت‌های ِ نسبی ِ خط‌های ِ چندگانه‌ها، و غیره، که در آن k نقش ِ مهمی بازی می‌کند در نظریه‌ی حاضر متفاوت خواهد شد، اما دیده خواهد شد که این موارد به همان شکل ِ قبل خواهند شد.

ابتدا قاعده‌ی انتخاب ِ j را تعیین می‌کنیم. از دو قضیه‌ی زیر استفاده می‌کنیم:—

(i) اگر یک متغیردینامیکی ِ X با j پادجابه‌جا شود، عناصر ِ ماتریسی‌اش تنها به گذارهای ِ $j \to -j$ منتسب هستاند.

(ii) اگر یک متغیر دینامیکی ِ Y رابطه‌ی

$$[\,[\mathrm{Y}, j\hbar], j\hbar] = -\mathrm{Y}, \tag{9}$$

را برآورده کند، عناصر ِ ماتریسی‌اش به گذارهای ِ $j \to j \pm 1$ منتسب هستاند.

برای اثبات ِ (i) مشاهده می‌کنیم که شرط ِ $j\mathrm{X} + \mathrm{X}j = 0$ می‌دهد

$$j' \,.\, \mathrm{X}(j'j'') + \mathrm{X}(j'j'') \,.\, j'' = 0$$

یا

$$(j' + j'') \,.\, \mathrm{X}(j'j'') = 0.$$

پس $\mathrm{X}(j'j'') = 0$ مگر این که $j'' = -j'$.

یک اثبات از (ii) که حاوی ِ متغیرهای ِ زاویه است در یک مقاله‌ی قبلی داده شده است.[3] یک اثبات ِ ساده مانند ِ آن چه برای (i) گفته شد به این قرار است. معادله‌ی (9) می‌دهد

$$\mathrm{Y}j^2 - 2j\mathrm{Y}j + j^2\mathrm{Y} = \mathrm{Y}$$

یا

$$\mathrm{Y}(j'j'') \,.\, j''^2 - 2j' \,.\, \mathrm{Y}(j'j'') \,.\, j'' + j'^2 \,.\, \mathrm{Y}(j'j'') = \mathrm{Y}(j'j'').$$

پس $\mathrm{Y}(j'j'') = 0$ مگر وقتی

$$j''^2 - 2j'j'' + j'^2 = 1,$$

'Roy. Soc. Proc.' A, vol. 111, p. 281 (1926), § 3.[3]

یعنی وقتی

$$j'' = j' \pm 1.$$

حال $[\,[x_3, j\hbar], j\hbar]$ را حساب می‌کنیم. تعریفِ j هست

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

از این رو

$$[x_3, j\hbar] = \rho_3\{\sigma_1[x_3, m_1] + \sigma_2[x_3, m_2]\}$$

$$= \rho_3(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1), \qquad (10)$$

چنان که

$$[\,[x_3, j\hbar], j\hbar] = [\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1, (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})].$$

حالا

$$i\hbar[\sigma_1, (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})] = \sigma_1(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m}) - (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})\sigma_1 = 2i(\sigma_3 m_2 - \sigma_2 m_3)$$

یا

$$\frac{1}{2}\hbar[\sigma_1, (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})] = \sigma_3 m_2 - \sigma_2 m_3,$$

و به طورِ مشابه

$$\frac{1}{2}\hbar[\sigma_2, (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{m})] = \sigma_1 m_3 - \sigma_3 m_1.$$

پس

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{2}\hbar[\,[x_3, j\hbar], j\hbar] = (\sigma_3 m_2 - \sigma_2 m_3)x_2 + \frac{1}{2}\hbar\sigma_1(\sigma_3 x_1 - \sigma_1 x_3) \\
-(\sigma_1 m_3 - \sigma_3 m_1)x_1 - \frac{1}{2}\hbar\sigma_2(\sigma_2 x_3 - \sigma_3 x_2) \\
= \sigma_3(\mathbf{m}, \mathbf{x}) - m_3(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) + \frac{1}{2}\hbar\{-\sigma_3(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) - x_3\} \\
= -\mathrm{M}_3(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) - \frac{1}{2}\hbar x_3,
\end{aligned}
$$

چنان که

$$
[\,[x_3, j\hbar], j\hbar] = -2u(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) - x_3.
$$

پس x_3، به خاطرِ جمله‌ی اضافه‌ی $-2u(\sigma, \mathbf{x})$، دقیقاً شرطِ (9) برای Y را برآورده نمی‌کند. اگرچه این جمله‌ی اضافه با j پادجابه‌جا می‌شود. حال اگر عبارتِ $x_3 - cu(\sigma, \mathbf{x})$ را تشکیل دهیم، که در آن c مقداری است که با j جابه‌جا می‌شود، می‌توان c را طوری انتخاب کرد تا عبارتِ جدید دقیقاً شرطِ Y در (9) را برآورده کند. در واقع داریم

$$
\begin{aligned}
[\,[x_3 - cu(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}), j\hbar], j\hbar] &= -2u(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) - x_3 + cu \;.\; 4j^2(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) \\
&= -\{x_3 - cu(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x})\}
\end{aligned}
$$

اگر c چنان انتخاب شود که

$$
-2 + 4j^2 c = c,
$$

یعنی اگر داشته باشیم

$$
c = 1/2(j^2 - \frac{1}{4}).
$$

پس x_3 می‌تواند به عنوانِ جمعِ دو جمله‌ی زیر بیان شود

$$
\frac{u}{2(j^2 - \frac{1}{4})}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}) \quad \text{و} \quad x_3 - \frac{u}{2(j^2 - \frac{1}{4})}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{x}),
$$

که در آن اولی با j پادجابه‌جا می‌شود، و بنابراین فقط شاملِ عناصرِ ماتریسی منتسب به گذارهایِ از نوعِ $j \rightarrow -j$ است، در حالی که دومی شرطِ Y در (9) را برآورده می‌کند، و بنابراین فقط شاملِ عناصرِ ماتریسی منتسب به گذارهایِ از نوعِ $j \rightarrow j \pm 1$ است. نتیجه‌ی مشابه برای x_1 و x_2 هم وجود دارد. پس قاعده‌ی انتخاب برای j می‌شود

$$j \rightarrow -j \qquad \text{یا} \qquad j \rightarrow j \pm 1.$$

بنابراین از حالت‌هایِ با $j = 2$ گذار به حالت‌هایِ $j = 1$، -2 و 3 می‌تواند انجام گیرد. با مقایسه‌ی این قاعده‌ی انتخاب با طرحی که مقدارهایِ j را به نمادهایِ S، P و D مرتبط می‌کرد می‌بینیم که این‌ها دقیقاً معادلِ دو قاعده‌ی انتخاب برای j و k یِ نظریه‌ی معمول هست‌اند، و در نتیجه با آزمایش توافق دارند.

§ 3. شدتِ نسبیِ خط‌هایِ یک چندگانه.

شدت‌هایِ نسبیِ مولفه‌هایِ متفاوتِ یک خط که در حضورِ میدانِ مغناطیسیِ ضعیف از هم جدا می‌شوند باید در نظریه‌ی حاضر مانندِ نظریه‌هایِ قبلی باشد، زیرا آن‌ها فقط به روابطِ جابه‌جائی که مختصه‌هایِ x_r را به مولفه‌هایِ تکانه‌زاویه‌ایِ کلِ M_r مربوط می‌کنند وابسته هست‌اند، که در نظریه‌ی حاضر بدونِ تغییر مانده‌اند. بنابراین کافی است که، برای تعیینِ شدتِ نسبیِ خط‌هایِ یک چندگانه فقط یک مولفه‌ی زیمنِ هر خط را در نظر گرفت، مثلاً مولفه‌ی با $\Delta u = 0$، یعنی مولفه‌ای که از x_3 می‌آید.

عناصرِ ماتریسیِ x_3 را وقتی که در پایه‌ای هست‌ایم که r، j، u و ρ_3 قطری هست‌اند تعیین می‌کنیم. x_3، به غیر از j، با همه‌ی این متغیرها قطری می‌شود (یعنی جابه‌جا می‌شود). قسمتی از x_3 که منتسب به گذارهایِ $j \rightarrow -j$ است پیدا شد

$$\frac{u}{2(j^2-\frac{1}{4})}(\boldsymbol{\sigma}, \mathrm{x}) = \frac{u}{2(j^2-\frac{1}{4})}\ \varepsilon\ \rho_1\ r, \tag{11}$$

که در آن از ε تعریف شده در § 6 از پیشین استفاده شده است. $\varepsilon\rho_1$ با j پادجابه‌جا می‌شود، چنان که فقط می‌تواند شاملِ عناصرِ ماتریسی از نوعِ $\varepsilon\rho_1(j, -j)$ باشد، و با شرطِ $(\varepsilon\rho_1)^2 = 1$ داریم

$$|\ \varepsilon\rho_1(j, -j)\ | = 1.$$

از این رو

$$| \ x_3(j,-j) \ | = \frac{u}{2(j^2-\frac{1}{4})} \ r \ |\varepsilon\rho_1(j,-j)| = \frac{u}{2(j^2-\frac{1}{4})} \ r. \tag{12}$$

دوباره، از (10) داریم

$$\{x_3 - i[x_3, j\hbar]\}\{x_3 + i[x_3, j\hbar]\} = \{x_3 - i\rho_3(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)\}\{x_3 + i\rho_3(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)\}$$

$$= x_3^2 + (\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)^2 = r^2,$$

که می‌دهد

$$\{(j+1)x_3 - x_3 j\}\{x_3(j+1) - jx_3\} = r^2.$$

اگر عناصرِ ماتریسیِ (j,j) را در دو طرفِ این معادله برابر قرار دهیم، در طرفِ چپ جمعِ سه جمله به دست می‌آید، که برابراند با عنصرِ ماتریسیِ $(j,-j)$ از براکتِ $\{\ \ \}$ اول در عنصرِ $(-j,j)$ دومی، عنصرِ $(j,j+1)$ اولی در عنصرِ $(j+1,j)$ دومی، و عنصرِ $(j,j-1)$ اولی در $(j-1,j)$ دومی. دومی از این سه تا صفر است، که می‌ماند

$$(2j+1)^2|x_3(j,-j)|^2 + 4 \ |x_3(j,j-1)|^2 = r^2.$$

از این رو

$$|x_3(j,j-1)|^2 = \frac{1}{4}r^2\left\{1 - \frac{u^2}{(j-\frac{1}{2})^2}\right\} = \frac{1}{4}r^2\frac{(j+u-\frac{1}{2})(j-u-\frac{1}{2})}{(j-\frac{1}{2})^2}. \tag{13}$$

با تبدیلِ j به $-j$ داریم

$$|x_3(-j,-j-1)|^2 = \frac{1}{4}r^2\frac{(j+u+\frac{1}{2})(j-u+\frac{1}{2})}{(j+\frac{1}{2})^2}. \tag{14}$$

سه عنصرِ ماتریسیِ از x_3 که در (12)، (13) و (14) داده شدند با سه مولفه از چندگانه‌ای که با ترکیبِ دو تا دوگانه تشکیل شده‌اند پیوند دارند. وقتی با یک تبدیل از پایه‌ای که در آن r، j، u و ρ_3

قطری هست‌اند به پایه‌ای که در آن همیلتونی قطری است برویم، نسبت‌های ِ این عناصر ِ ماتریسی، در تقریب ِ اول، بدون ِ تغییر می‌مانند، و بنابراین شدت‌های ِ نسبی ِ مولفه‌های ِ زیمن $\Delta u = 0$ در دوگانه‌ی ترکیبی را می‌دهند. این نسبت‌ها با آن‌هائی که از نظریه‌های ِ قبلی بر اساس ِ الکترون ِ اسپین‌دار به دست می آید توافق دارد.

§ 4. اثر ِ زیمن.

برای یک میدان ِ مغناطیسی ِ یک‌نواخت با شدت ِ H در راستای ِ x_3 می‌توان پتانسیل ِ مغناطیسی را به شکل ِ زیر گرفت

$$\mathrm{A}_1 = -\frac{1}{2}\mathrm{H}x_2, \qquad \mathrm{A}_2 = \frac{1}{2}\mathrm{H}x_1, \qquad \mathrm{A}_3 = 0.$$

حالا جملات ِ اضافی‌ای که در همیلتونی ِ F ظاهر می‌شوند عبارت‌اند از

$$\Delta\mathrm{F} = \rho_1 e' \; (\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{A}) = -\frac{1}{2}\; \mathrm{H}e'\rho_1(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1).$$

از (10) برمی‌آید که $(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)$ یا $\rho_3(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)$، مانند ِ x_3، فقط شامل ِ عناصر ِ ماتریسی از نوع ِ $(j,-j)$ یا $(j, j \pm 1)$ است. حالا ρ_1 با j پادجابه‌جا می‌شود، و بنابراین فقط شامل ِ عناصر ِ ماتریسی از نوع ِ $(j,-j)$ است. از این رو $\Delta\mathrm{F}$ فقط شامل ِ عناصر ِ ماتریسی از نوع ِ (j,j) یا $(j, -j \pm 1)$ است.

در § 6 از پیشین، پیدا شد که همیلتونی می‌تواند به شکل ِ زیر بیان شود [معادله‌ی (24) را ببینید]

$$\mathrm{F} \equiv p_0 + \mathrm{V} + \varepsilon p_r + i\varepsilon\rho_3 j\hbar/r + \rho_3 mc. \tag{15}$$

از (10) برمی‌آید که $(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)$ با (σ, x)، و بنابراین با ε، پادجابه‌جا می‌شود. پس اگر قرار دهیم

$$\Delta\mathrm{F} = i\hbar\varepsilon\rho_3\eta r,$$

چنان که

$$\eta = \frac{1}{2}\mathrm{H}e/c\hbar \; . \; \varepsilon\rho_2(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)/r,$$

با ε جابه‌جا می‌شود. به علاوه، η، با ρ_3، r و p_r هم جابه‌جا می‌شود، که باعث می‌شود با همه‌ی متغیرهایِ ظاهرشده در (15) غیر از j جابه‌جا شود. حال اگر η را به عنوانِ یک ماتریس در j بیان کنیم، عبارتی برای $\Delta \mathrm{F}$ بر حسبِ متغیرهایِ ظاهرشده در (15) به دست آورده‌ایم. از (10) و (13) داریم

$$|\rho_3(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)(j, j-1)|^2 = |x_3(j, j-1)|^2 = \frac{1}{4} r^2 \frac{(j+u-\frac{1}{2})(j-u-\frac{1}{2})}{(j-\frac{1}{2})^2}.$$

و به طورِ مشابه

$$|\rho_3(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)(j, j+1)|^2 = |x_3(j, j+1)|^2 = \frac{1}{4} r^2 \frac{(j+u+\frac{1}{2})(j-u+\frac{1}{2})}{(j+\frac{1}{2})^2}.$$

دیدیم که عناصرِ ماتریسِ $\varepsilon\rho_1$، همان‌ها که از نوعِ $(j, -j)$ هست‌اند، باید ریشه‌ای از واحد باشند. از این رو

$$\left.\begin{aligned} |\eta(j, -j-1)|^2 &= \left(\frac{\mathrm{H}e}{2c\hbar r}\right)^2 |i\varepsilon\rho_1(j, -j)|^2 |\rho_3(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)(-j, -j-1)|^2 \\ &= \left(\frac{\mathrm{H}e}{4c\hbar}\right)^2 \frac{(j+u+\frac{1}{2})(j-u+\frac{1}{2})}{(j+\frac{1}{2})^2} \\ &\text{و به طورِ مشابه} \\ |\eta(j, -j+1)|^2 &= \left(\frac{\mathrm{H}e}{4c\hbar}\right)^2 \frac{(j+u-\frac{1}{2})(j-u-\frac{1}{2})}{(j-\frac{1}{2})^2} \end{aligned}\right\}. \qquad (16)$$

دوباره از (10) و (11) داریم

$$\rho_3(\sigma_1 x_2 - \sigma_2 x_1)(-j, j) = -2ij \,.\, x_3(-j, j) = -\frac{u}{(j^2 - \frac{1}{4})} irj \,.\, (\varepsilon\rho_1)(-j, j),$$

چنان که

$$\eta(j, j) = \frac{\mathrm{H}e}{2c\hbar} \frac{uj}{j^2 - \frac{1}{4}}. \qquad (17)$$

اگر حالا، مانندِ پیشین، معادله‌موجِ متناظرِ (15) را با لحاظِ جمله‌ی اضافیِ $\Delta\mathrm{F}$ به طورِ کامل بنویسیم، داریم

$$[(\mathrm{F}+\Delta\mathrm{F})\psi]_\alpha = (p_0+\mathrm{V})\psi_\alpha - \hbar\frac{\partial}{\partial r}\psi_\beta - \left(\frac{j}{r}+\eta r\right)\hbar\psi_\beta + mc\psi_\alpha = 0,$$
$$[(\mathrm{F}+\Delta\mathrm{F})\psi]_\beta = (p_0+\mathrm{V})\psi_\beta + \hbar\frac{\partial}{\partial r}\psi_\alpha - \left(\frac{j}{r}+\eta r\right)\hbar\psi_\alpha - mc\psi_\beta = 0,$$

که η حالا یک عمل‌گر است که رویِ ψ_α و ψ_β اثر می‌کند، که با همه چیز غیر از j جابه‌جا می‌شود. با حذفِ ψ_α، متناظر با (25) از پیشین داریم:

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

می‌توانیم از جمله‌ی $\eta^2 r^2$، که با مربعِ شدت میدان متناسب است، و هم‌چنین از جمله‌ی ηr در براکتِ آخر، که از مرتبه‌ی شدت میدانِ مغناطیسی در تصحیحِ اسپین است، صرف‌نظر کنیم. تنها اثرِ مرتبه‌ی اول در میدان جاگذاریِ جمله‌هایِ $\eta - \eta j - j\eta$ در براکتِ اول است. اکنون این براکت را می‌توان نوشت

$$\left[\frac{2m\mathrm{E}}{\hbar^2} + \frac{\mathrm{E}^2}{c^2\hbar^2} + \frac{2(\mathrm{E}+mc^2)}{c\hbar^2}\mathrm{V} + \frac{\mathrm{V}^2}{\hbar^2} - \frac{j(j+1)}{r^2} + \eta - \eta j - j\eta\right], \qquad (18)$$

که در آن E انرژیِ لایه، برابرِ $p_0c - mc^2$ است.

اگر میدان در مقایسه با جدائیِ دوگانه ضعیف باشد، می‌توانیم تقریبِ اولِ تغییرِ انرژیِ لایه‌ها را با صرف‌نظر کردن از عناصرِ غیرقطریِ $\Delta\mathrm{F}$ یا η به دست آوریم. جمله‌های اضافیِ $\eta - \eta j - j\eta$ در (18) حالا به عوضِ یک عمل‌گر یک ثابت است، که از (17) می‌شود

$$-(2j-1)\eta(j,j) = -\frac{\mathrm{H}e}{c\hbar}\frac{uj}{j+\frac{1}{2}}$$

انرژیِ لایه‌ها به مقدارِ $\hbar^2/2m$ در این ثابت کاهش می‌یابد، اگر از ظهورِ E یِ مشخصه در جاهایِ دیگرِ (18) به غیر از $2m\mathrm{E}/\hbar^2$ صرف‌نظر کنیم، که به این معنی است که برهم‌کنشِ میدانِ مغناطیسی با

تغییراتِ نسبیتیِ جرم با سرعت را کنار گذاشته‌ایم. پس افزایشِ انرژیِ لایه‌ها در اثرِ میدانِ مغناطیس می‌شود

$$\frac{\mathrm{He}}{2mc}\frac{j}{j+\frac{1}{2}}u\hbar = \omega g u\hbar$$

که در آن ω بس‌آمد لارمورِ $\mathrm{He}/2mc$، و g ضریبِ شکافته‌گی لَنده، با مقدارِ زیر است

$$g = j/(j+\frac{1}{2}).$$

برای توالیِ مقادیرِ j، 1، -1، 2، -2، 3، -3، ... می‌بینیم g مقادیرِ 2، $\frac{2}{3}$، $\frac{4}{3}$، $\frac{4}{5}$، $\frac{6}{5}$، ... را می‌گیرد که با رابطه‌ی لنده برای طیفِ قلیائی‌ها توافق دارد.

حال وضعیتی را در نظر می‌گیریم که میدانِ مغناطیسی در مقایسه با جدائیِ دوگانه قوی، ولی در مقایسه با جدائیِ جمله‌هایِ سری‌هایِ مختلف کوچک است. این اقتضا می‌کند که عناصرِ ماتریسیِ η از نوعِ $\eta(j,-j-1)$ با $j>0$ را در نظر بگیریم، اگرچه آن‌هائی که از نوعِ $\eta(j,-j+1)$ هست‌اند هم چنان قابلِ صرف‌نظراند. حالا کاهش در انرژیِ لایه‌ها تقریباً برابر است با $\hbar^2/2m$ در یکی یا دیگر مقدارمشخصه‌هایِ جملاتِ اضافیِ $\eta-\eta j-j\eta$ در (18). این مقدارمشخصه‌ها ریشه‌هایِ ξ در معادله‌ی

$$\begin{vmatrix} (\eta-\eta j-j\eta)(j,j)-\xi & (\eta-\eta j-j\eta)(j,-j-1) \\ (\eta-\eta j-j\eta)(-j-1,j) & (\eta-\eta j-j\eta)(-j-1,-j-1)-\xi \end{vmatrix} = 0.$$

یا

$$\begin{vmatrix} -(2j-1)\ .\ \eta(j,j)-\xi & 2\eta(j,-j-1) \\ 2\eta(-j-1,j) & (2j+3)\ .\ \eta(-j-1,-j-1)-\xi \end{vmatrix} = 0.$$

هست‌اند. با کمکِ (16) و (17) داریم

$$\xi^2 + \frac{\mathrm{He}}{c\hbar}\left[\frac{uj}{j+\frac{1}{2}} + \frac{u(j+1)}{j+\frac{1}{2}}\right]\xi + \left(\frac{\mathrm{He}}{c\hbar}\right)^2\left[\frac{u^2 j(j+1)}{(j+\frac{1}{2})^2} - \frac{(j+\frac{1}{2})^2-u^2}{4(j+\frac{1}{2})^2}\right] = 0,$$

که به

$$\xi^2 + \frac{\mathrm{H}e}{c\hbar}2u\xi + \left(\frac{\mathrm{H}e}{c\hbar}\right)^2(u^2 - \frac{1}{4}) = 0$$

می‌رسد. از این رو

$$\xi = -\frac{\mathrm{H}e}{c\hbar}(u \pm \frac{1}{2}).$$

پس افزایشِ انرژیِ لایه‌ها ناشی از میدانِ مغناطیسی می‌شود

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\xi = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{H}e}{c\hbar}(u \pm \frac{1}{2}) = \omega(u \pm \frac{1}{2})\hbar,$$

که با اثرِ پاشن–بک در نظریه‌ی قبلیِ الکترونِ اسپین‌دار توافق دارد.

ممکن است انتظار برود که با میدان‌هایِ مغناطیسیِ قوی‌تر عناصرِ ماتریسیِ $(j, -j+1)$ از η وارد بازی شوند، و باعثِ تداخلِ بینِ طرح‌هایِ زیمن از جملاتی بشوند که عددِ کوانتومیِ k شان در نمادگذاریِ معمول 2 تا با هم فاصله دارند. اما عناصرِ ماتریسیِ $(j, -j+1)$ از $j\eta - \eta j - \eta$، برای مقدارِ دل‌خواهِ η صفر می‌شوند، به طوری که اثری از این نوع به وجود نمی‌آید.