狄拉克：The Eigentutor in the era of quantum mechanics (上)

曹则贤†

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

2025－01－24收到

† email：zxcao@iphy.ac.cn

DOI：10.7693/wl20250206

CSTR：32040.14.wl20250206

说英雄谁是英雄？索末菲帐下众侠，玻恩派门内群英，狄拉克天降孤星。

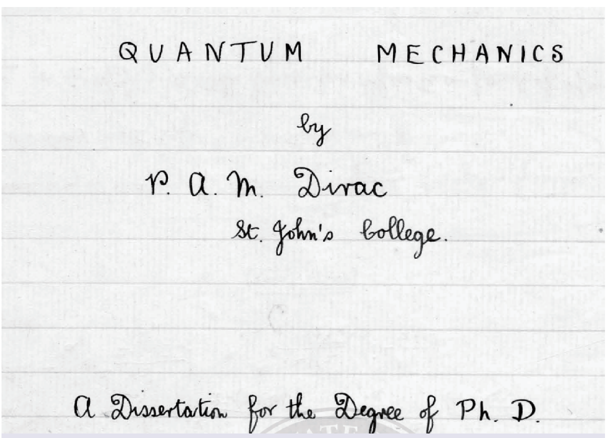
大道晦涩，自教者明。

摘 要 狄拉克是量子力学奠基人中非常独特的一位，凭借一系列重要成就把自己塑造成了人类第一个量子力学博士。狄拉克1925年跟上矩阵力学的发展得到了量子力学基本方程，1926年跟上波动力学的发展得到了狄拉克统计，1928年得到了让其不朽的相对论量子力学方程，后来基于此方程提出了反粒子的概念，此外他还系统地发展了量子力学表示理论。狄拉克的《量子力学原理》一书是量子力学表述的经典，是一本不可多得的关于如何创造物理的教科书。

关键词 量子微分，量子力学，相对论量子力学，表示理论，对易关系，狄拉克δ-函数，产生—湮灭算符，Bra-ket记号，矩阵力学，波动力学，电磁场量子化，变换理论，反电子，反质子，狄拉克统计，磁极量子

0 EigenTutor狄拉克

狄拉克是量子力学奠基者中贡献颇著且个人魅力非常独特的一位，谈论量子力学绕不过狄拉克。狄拉克被誉为麦克斯韦之后不列颠最伟大的理论物理学家。然而，谈论狄拉克极不容易。为了更好地描述狄拉克其人其事，请允许我先造一个字，Eigentutor (自教者)。我是基于Eigenwert (本征值) 和MacTutor (大导师)这两个词造的Eigentutor这个词。Eigenwert是“线的代数”这门学科的关键词，它可以说是量子力学的代名词(请记住薛定谔1926年创立波动力学的那篇文章的题目，Quantisierung als Eigenwertproblem)，而MacTutor指的是学问极大的导师。如果门下的学生也是大师级的，这样的导师可以称为MacTutor of Maestros (大师的大导师)，量子论的奠基人索末菲和量子力学的奠基人玻恩都是MacTutor of Maestros。狄拉克凭借自己参与创造量子力学的成就 (没有导师Ralph Fowler的参与)成为了人类的第一个量子力学博士，其1926年的博士论文题目就是简单的两个字：Quantum mechanics (图1)。{这个博士论文的题目让我想起《舌尖上的中国》那句著名的解说词：高端的食材往往只需要最简单的烹饪方式}。狄拉克显然是一个EigenTutor，如果嫌EigenTutor不足以表达狄拉克自教的成就之高，那就用EigenMacTutor一词好了。


QUANTUM MECHANICS

by

P. A. M. Dirac

St. John's College.

A Dissertation for the Degree of Ph. D.

图1 狄拉克申请博士学位的手写论文

真正的成大学问者，Eigentutelage (自我指导)

是必须的。一个人如果学习上指望老师，那这个社会是指望不上他了。

狄拉克(Paul Adrien Maurice Dirac，1902—1984)是英国数学家和理论物理学家，父亲是来自瑞士的移民，在英国教法语，母亲是英国人。狄拉克1921年在布里斯托大学获电机工程专业学士学位，因为获得的70磅的奖学金不足以支持在剑桥的费用，故狄拉克接着在布里斯托大学免费学习，于1923年获得数学学士学位(这一点对于理解狄拉克的成就太重要了)。因为成绩优异，狄拉克又获得了一笔140磅的奖学金，于是狄拉克到剑桥的圣约翰学院继续学习广义相对论(相对论一直是狄拉克学问的底色)。狄拉克1924年发表第一篇研究论文(研究玻尔条件的，收稿日期为7月14日)，于1926年凭借量子力学研究成果获得博士学位。

1　狄拉克的量子力学著述

狄拉克在量子力学方面的专著包括如下五种：

(1) P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Cambridge University Press (1930).

(2) P. A. M. Dirac, *Spinors in Hilbert Space*, Plenum Press (1974).

(3) P. A. M. Dirac, *Lectures on Quantum Mechanics*, Yeshiva University (1964).

(4) P. A. M. Dirac, *Lectures on Quantum Field Theory*, Yeshiva University (1966).

(5) P. A. M. Dirac, *Aspects of Quantum Theory*, Cambridge University Press (1972).

《量子力学原理》一书1930年出版，狄拉克时年28岁。这也是狄拉克人生的第一本著作。该书在1935年出版了几乎重写的第二版，1947年的第三版采用了bra-ket记号，在1958年出了第四版后不再有改版(1967年出了第四版的修订本)，至今被译成了各种不同的语言在世界传播(图2)。狄拉克的《量子力学原理》生动地诠释了什么是“出道即巅峰”。虽然这本书因狄拉克特别在意自创量子力学的表示理论而特别晦涩难懂 (笔者个人的感觉)，但对于后世的量子力学学习者来说，

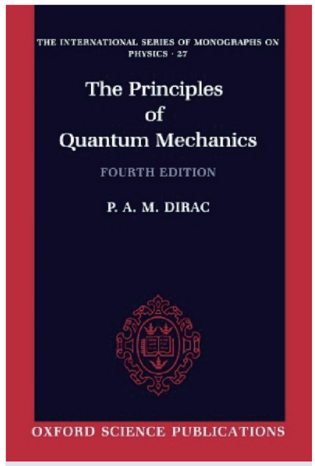


图2　*The Principles of Quantum Mechanics*, 1930

它一直是绕过不去的坎儿。汲取其中的知识营养，将其用于促进人类文明的进步，是对知识创造者最大的尊重。

狄拉克自1924年起发表的量子力学方面的论文罗列如下：

(1) P. A. M. Dirac, Note on the Doppler principle and Bohr’s frequency condition, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 22(3), 432—433 (1924).

(2) P. A. M. Dirac, The adiabatic invariance of the quantum integrals, *Proceedings of the Royal Society of London* A107(744), 725—734 (1925).

(3) P. A. M. Dirac, The conditions for statistical equilibrium between atoms, electrons and radiation, *Proceedings of the Royal Society of London* A106 (739), 581—596(1925).

(4) P. A. M. Dirac, The fundamental equations of quantum mechanics, *Proceedings of the Royal Society of London* A109(752), 642—653 (1925).

(5) P. A. M. Dirac, The elimination of the nodes in quantum mechanics, *Proceedings of the Royal Society of London* A111(757), 281—305 (1926).

(6) P. A. M. Dirac, On quantum algebra. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 23(4), 412—418 (1926).

(7) P. A. M. Dirac, Quantum mechanics and a

preliminary investigation of the hydrogen atom, *Proceedings of the Royal Society of London* A110 (755), 561—579 (1926).

(8) P. A. M. Dirac, Relativity quantum mechanics with an application to Compton scattering, *Proceedings of the Royal Society of London* A111 (758), 405—423 (1926).

(9) P. A. M. Dirac, On the theory of quantum mechanics, *Proceedings of the Royal Society of London* A112(762), 661—667 (1926).

(10) P. A. M. Dirac, The Compton effect in wave mechanics, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 23(5), 500—507 (1927).

(11) P. A. M. Dirac, The physical interpretation of the quantum dynamics, *Proceedings of the Royal Society of London* A113(765), 621—641 (1927).

(12) P. A. M. Dirac, The quantum theory of dispersion, *Proceedings of the Royal Society of London* A114 (769), 710—728 (1927).

(13) P. A. M. Dirac, The quantum theory of the emission and absorption of radiation, *Proceedings of the Royal Society of London* A114(767), 243—265 (1927).

(14) P. A. M. Dirac, Über die Quantenmechanik der Stoßvorgänge (论碰撞过程的量子力学), *Zeitschrift für Physik* 44, 585—595 (1927).

(15) P. A. M. Dirac, The quantum theory of the electron, *Proceedings of the Royal Society of London* A117(778), 610—624 (1928); II, A118(779), 351—361 (1928).

(16) P. A. M. Dirac, Über die Quantentheorie des Elektrons (论电子的量子理论), *Physikalische Zeitschrift* 29, 561—563 (1928).

(17) P. A. M. Dirac, The basis of statistical quantum mechanics, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 25(1), 62—66 (1929).

(18) P. A. M. Dirac, Quantum mechanics of many electron systems, *Proceedings of the Royal Society of London* A123(792),714—733 (1929).

(19) P. A. M. Dirac, Note on exchange phenomena in the Thomas atom, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 26(3), 376—385(1930).

(20) P. A. M. Dirac, Note on the interpretation of the density matrix in the many-electron problem, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 27(2), 240—243 (1930).

(21) P. A. M. Dirac, On the annihilation of electrons and protons, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 26(3), 361—375 (1930).

(22) P. A. M. Dirac, The proton, *Nature* 126 (3181), 605—606 (1930).

(23) P. A. M. Dirac, A theory of electrons and protons, *Proceedings of the Royal Society of London* A126 (801), 360—365 (1930).

(24) P. A. M. Dirac, Quantised singularities in the electromagnetic field, *Proceedings of the Royal Society of London* A133(821), 60—72 (1931).

(25) P. A. M. Dirac, Relativistic quantum mechanics, *Proceedings of the Royal Society of London* A136(829), 453—464 (1932).

(26) P. A. M. Dirac, The Lagrangian in quantum mechanics, *Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion* 3(1), 64—72 (1933).

(27) P. A. M. Dirac, Statement of a problem in quantum mechanics, *Journal of the London Mathematical Society* 8, 274—277 (1933).

(28) P. A. M. Dirac, Homogeneous variables in classical dynamics, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 29(3), 389—400 (1933).

(29) P. A. M. Dirac, Discussion of the infinite distribution of electrons in the theory of the positron, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 30(2), 150—163 (1934).

(30) P. A. M. Dirac, The electron wave equation in de Sitter space, *Annals of Mathematics* 36(3), 657

—669 (1935).

(31) P. A. M. Dirac, Does conservation of energy hold in atomic processes? *Nature* 137(3460), 298—299 (1936).

(32) P. A. M. Dirac, Relativistic wave equations, *Proceedings of the Royal Society of London* A155 (886), 447—459 (1936).

(33) P. A. M. Dirac, Wave equations in conformal space, *Annals of Mathematics* 37(2), 429—442 (1936).

(34) P. A. M. Dirac, Complex variables in quantum mechanics, *Proceedings of the Royal Society of London* A160(900), 48—59 (1937).

(35) P. A. M. Dirac, The reversal operator in quantum mechanics, *Izv. Akad. Nauk. SSSR*, 4-5, 569—575 (English), 576—582 (Russian) (1937).

(36) P. A. M. Dirac, Classical theory of radiating electrons, *Proceedings of the Royal Society of London* A167(929), 148—169 (1938).

(37) P. A. M. Dirac, La théorie de l'électron et du champ électromagnétique (电子的与电磁场的理论), *Annales de l'Institut Henri Poincaré* 9(2), 13—49 (1939).

(38) P. A. M. Dirac, A new notation for quantum mechanics, *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 35(3), 416—418 (1939).

(39) P. A. M. Dirac, The relation between mathematics and physics, *Proceedings of the Royal Society of Edinburgh* 59, 122—129 (1939).

(40) P. A. M. Dirac, The physical interpretation of quantum mechanics, *Proceedings of the Royal Society of London* A180(980), 1—40 (1942).

(41) Paul A. M. Dirac, Quantum electrodynamics, *Communications of the Dublin Institute for Advanced Studies* A1943(1), 1—36 (1943).

(42) P. A. M. Dirac, On the analogy between classical and quantum mechanics, *Reviews of Modern Physics* 17(2-3),195—199 (1945).

(43) P. A. M. Dirac, Application of quaternions to Lorentz transformations, *Proceedings of the Royal Irish Academy* A50, 261—270 (1945).

(44) P. A. M. Dirac, Unitary representations of the Lorentz group, *Proceedings of the Royal Society of London* A183(994), 284—295 (1945).

(45) P. A. M. Dirac, Developments in quantum electrodynamics, *Communications of the Dublin Institute for Advanced Studies* A1946(1), 3—33 (1946).

(46) P. A. M. Dirac, Magnetic poles, *Physics Today* 1(7), 26, November (1948).

(47) P. A. M. Dirac, On the theory of point electrons, *Philosophical Magazine* 39, 31—34 (1948).

(48) P. A. M. Dirac, Quantum theory of localizable dynamical systems, *Physical Review* 73(8), 1092—1103 (1948).

(49) P. A. M. Dirac, The theory of magnetic poles, *Physical Review* 74(7), 817—830 (1948).

(50) P. A. M. Dirac, Forms of relativistic dynamics, *Reviews of Modern Physics* 21(3), 392—399 (1949).

(51) P. A. M. Dirac, La seconde quantication (二次量子化), *Annales de l'Institut Henri Poincaré* 11 (1), 15—47 (1949).

(52) P. A. M. Dirac, The relation of classical to quantum mechanics, *Proceedings of the Second Canadian Mathematics Congress*, 10—31(1949).

(53) P. A. M. Dirac, Generalized Hamiltonian dynamics, *Canadian Journal of Mathematics* 2, 129—148 (1950).

(54) P. A. M. Dirac, The Hamiltonian form of field dynamics, *Canadian Journal of Mathematics* 3, 1—23 (1951).

(55) P. A. M. Dirac, Quantum mechanics and the aether, *The Scientific Monthly* 78(3), 142—146 (1954).

(56) P. A. M. Dirac, Note on the use of non-orthogonal wave functions in perturbation calculations, *Canadian Journal of Physics* 33(12),709—712 (1955).

(57) P. A. M. Dirac, Equivalence of the Schrödinger and Heisenberg pictures, *Nature* 204

(4960), 772 (1964).

(58) P. A. M. Dirac, Foundations of quantum mechanics, *Nature* 203(4941),115—116 (1964).

(59) P. A. M. Dirac, Hamiltonian methods and quantum mechanics, *Proceedings of the Royal Irish Academy* A63, 49—59 (1964).

(60) P. A. M. Dirac, A positive-energy relativistic wave equation, *Proceedings of the Royal Society of London* A322(1551), 435—445 (1971); II, A328 (1572), 1—7 (1972).

(61) P. A. M. Dirac, Relativity and quantum mechanics, *Fields and Quanta* 3, 139—164 (1972).

(62) P. A. M. Dirac, Fundamental equations of quantum mechanics, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk* 122 (8), 611—621 (1977).

(63) P. A. M. Dirac, The relativistic electron wave equation, *Europhysics News* 8(10), 1—4 (1977).

此不完全统计只收录狄拉克的明显是关于量子力学的期刊文章，关于量子场论和量子电动力学的文章以及出现在他人编辑之单行本中的文章未收入。狄拉克是个很羞涩的人，上述63篇文章的总作者数为63；在其他署名狄拉克的文章与书籍中，狄拉克也都是唯一作者，完全避免了在别人文章上署名的嫌疑。与狄拉克相比，钱钟书所谓“大抵学问是荒江野老屋中二三素心人商量培养之事”一句中的素心人就显得猥琐了些。此外，狄拉克还有两篇文章是法文的，两篇是德文的，其中的“论碰撞过程的量子力学”一文与玻恩1926的文章同名。

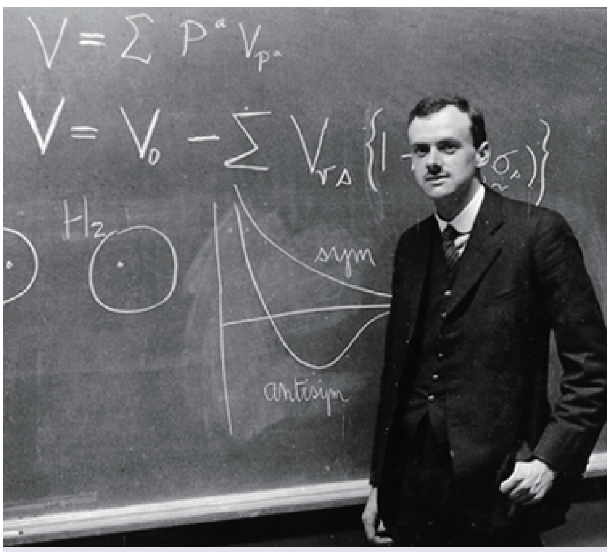


图3　狄拉克讲述量子力学

从以上简单的文献罗列中，读者对狄拉克对量子力学贡献之钜可能都多少有点儿感觉了。

狄拉克还一直讲授量子力学，当然会基于他自己的发现与著述。J. C. Polkinghorne回忆当年狄拉克在剑桥讲量子力学(图3)，访问学者们都会把直接从创造者口中听到量子理论的讲述(hear an account of quantum theory “straight from the horse’s mouth”)当成在剑桥最重要的经历。据信狄拉克关于量子力学的讲述会表明清晰优雅的数学思考是理解物理世界之结构的关键(…clear and elegant mathematical thinking was the key to the understanding of the structure of the physical world)。

2　狄拉克量子力学成就盘点

2.1　量子力学基本方程

狄拉克1925年的The fundamental equations of quantum mechanics一文是对海森堡1925年文章(误传为矩阵力学的第一篇)的响应，这大概是他人生的第四篇论文。狄拉克的这篇文章对矩阵力学的确立不可或缺，应该这样评价的另一篇是泡利的用矩阵力学解氢原子问题的文章。狄拉克的这篇文章在本系列论矩阵力学的文章中简单提及过。

海森堡的文章指出不是经典力学的方程有错，而是从方程得到物理结果的数学操作需要改变。经典力学是这么干的。考察一个u自由度的力学系统，假设坐标表示成多重傅里叶级数的形式：

$$x=\sum_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_u}x(\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_u)\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha_1\omega_1+\alpha_2\omega_2+\cdots+\alpha_u\omega_u)t}=\sum_{\alpha}x_\alpha\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha\omega)t},$$

其中第二个等式是符号简记。把这个表达代入运动方程，令两侧的任一简谐项的系数相等，得到的方程暂且称为“A-方程”，其解不是唯一的。

振幅和频率可以表示为u个运动常数$k_1k_2\cdots k_u$的函数。每一个x_α和$(\alpha\omega)$都是一个两组数α和k的函数，记为$x_{\alpha k}$和$(\alpha\omega)_k$。

按照海森堡的提议，量子理论的解是这样的。依然是用$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}$的简谐分量表示，振幅和频率都用两组数表示，记为$x(nm)$和$\omega(nm)$。对应此前的$\alpha_r$可以认为是差$n_r-m_r$，但是$k$不知道该如何表示，它不能是单个$n$，$m$的函数。量子解是互锁的，必须当作一个整体看待。按照海森堡的色散条件$\omega(nm)+\omega(mk)=\omega(nk)$，容易得到频率条件，$\omega(nm)=\Omega(n)-\Omega(m)$。狄拉克管$\Omega(n)$叫做 frequency levels (频率阶梯，频级)。从经典的乘法关系：

$$a_{\alpha k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha\omega)_k t}b_{\beta k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\beta\omega)_k t}=(ab)_{\alpha+\beta,k}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha+\beta,\omega)_k t},$$

这个对振幅部分的表示要求有关系$(ab)_{\alpha+\beta,k}=a_{\alpha k}b_{\beta k}$。对应的量子玩法可以是：

$$a(nm)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(nm)t}b(mk)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(mk)t}=ab(nk)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(nk)t},$$

应有关系$ab(nk)=a(nm)b(mk)$，这就是矩阵乘法。

运动方程不足以解决量子问题。在经典理论中，会选择$\partial E/\partial k_r=\omega_r/2\pi$，也就是说选择$k_r$为作用变量{action variable。参见经典力学的action-angle variables理论}。接下来要做的是找到相应的量子条件，其对应这个方程。

在文章的第三节中，根据经典微分$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}(x+y)=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}v}+\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}v}$；$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}v}(xy)=\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}v}y+x\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}v}$，现在要构造量子微分$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}v}(nm)$。根据第一个条件，这个微分必是$x$的线性函数，记为$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}v}(nm)=\sum_{nm}a(nm;n'm')x(n'm')${原文如此。应为$\sum_{n'm'}a(nm;n'm')x(n'm')$}，其中系数$a$依赖于四个整数指标。根据第二个条件，这意味着：

$$\begin{gathered}\sum_{n'm'k}a(nm;n'm')x(n'k)y(km')=\\ \sum_{km'k'}a(nm;n'k')x(n'k')y(km)+\\ \sum_{kk'm}x(nk)a(km;k'm')y(k'm').\end{gathered}$$

比较两边同类项系数，发现结果可约化为

$$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}v}(nm)=\sum_k\{x(nk)a(km)-a(nk)x(km)\},$$

即$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}v}=xa-ax$。这意思是，对某个量子变量的微分可表示为与另一量子变量的对易式。当a为常数，只有对角项不为0，则$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}v}(nm)=x(nm)a(mm)-a(nn)x(nm)$。如取$\mathrm{i}a(mm)=\Omega(m)$，则有$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}v}(nm)=\mathrm{i}\omega(nm)x(nm)$。这是关于$t$的量子微分。{笔者以为，这是量子力学教科书不该遗漏的一环。前提是量子力学的线性结构，这是狄拉克在表述量子力学时一再强调的关键事实。许多量子力学教科书照抄一些量子力学方程，连方程中符号的意义都没交代清楚}。

第四节谈论量子条件。考虑$(xy-yx)$的表示。假设$x(n,n-\alpha)$关于n的变化很慢，n是大数，α是小的数，可以写成$x(n,n-\alpha)=x_{\alpha\kappa}$，其中$\kappa_r=n_rh$，或者$(n_r+\alpha)h$，两者等价。{看不懂这地方的读者可参照海森堡1925年的文章和此文章的前半部分仔细体会。}

$$\begin{gathered}x(n,n-\alpha)y(n-\alpha,n-\alpha-\beta)-y(n,n-\beta)\times\\ x(n-\beta,n-\alpha-\beta)=\\ \{x(n,n-\alpha)-x(n-\beta,n-\alpha-\beta)\}\times\\ y(n-\alpha,n-\alpha-\beta)-\\ \{y(n,n-\beta)-y(n-\alpha,n-\alpha-\beta)\}\times\end{gathered}$$

$$x(n-\beta,n-\alpha-\beta)=h\sum_r\left\{\beta_r\frac{\partial x_{\alpha\kappa}}{\partial\kappa_r}y_{\beta\kappa}-\alpha_r\frac{\partial y_{\beta\kappa}}{\partial\kappa_r}x_{\alpha\kappa}\right\}.$$

有表示$2\pi\mathrm{i}\beta_r y_\beta\exp\mathrm{i}(\beta\omega)t=\frac{\partial}{\partial w_r}\{y_\beta\exp\mathrm{i}(\beta\omega)t\}$，其中$w_r=\omega_r t/2\pi$是角变量。这样，$(xy-yx)$的$(nm)$分量在经典理论中对应：

$$\begin{gathered}\frac{\mathrm{i}h}{2\pi}\sum_{\alpha+\beta=n-m}\sum_r\left\{\frac{\partial}{\partial\kappa_r}\{x_\alpha\exp\mathrm{i}(\alpha\omega)t\}\times\right.\\ \frac{\partial}{\partial w_r}\{y_\beta\exp\mathrm{i}(\beta\omega)t\}-\frac{\partial}{\partial\kappa_r}\{y_\beta\exp\mathrm{i}(\beta\omega)t\}\times\\ \left.\frac{\partial}{\partial w_r}\{x_\alpha\exp\mathrm{i}(\alpha\omega)t\}\right\}.\end{gathered}$$

也就是$(xy-yx)$对应：$-\frac{\mathrm{i}h}{2\pi}\sum_r\left\{\frac{\partial x}{\partial\kappa_r}\frac{\partial y}{\partial w_r}-\frac{\partial y}{\partial\kappa_r}\frac{\partial x}{\partial w_r}\right\}$。

如果令κ_r等于作用变量J_r，就有泊松括号：

$$[x,y]=\sum_r\left\{\frac{\partial x}{\partial w_r}\frac{\partial y}{\partial J_r}-\frac{\partial y}{\partial w_r}\frac{\partial x}{\partial J_r}\right\}$$
$$=\sum_r\left\{\frac{\partial x}{\partial q_r}\frac{\partial y}{\partial p_r}-\frac{\partial y}{\partial q_r}\frac{\partial x}{\partial p_r}\right\}.$$

泊松括号有关系$[q_r,q_s]=0$，$[p_r,p_s]=0$，$[q_r,p_s]=\delta_{rs}$，于是有$q_rq_s-q_sq_r=0$，$p_rp_s-p_sp_r=0$，$q_rp_s-p_sq_r=\mathrm{i}\hbar\delta_{rs}$。

这里用到了所谓与经典情形的对应，在后来的正经量子科学家那里引起了不少误解。如同预防针似的，狄拉克写道：“The correspondence between the quantum and classical theories lies not so much in the limiting agreement when $h\to 0$ as in the fact that the mathematical operations on the two theories obey in many cases the same laws”。1925年，狄拉克就清清楚楚地提醒了，而100年后仍能看到有人在谈论什么经典力学是量子理论取极限$h\to 0$后应有的结果。

提醒一句，看懂这一节需要经典力学的作用——角变量、摄动论部分的知识(拉格朗日就是在研究这个问题注意到一类特殊括号意义的，写出了拉格朗日括号，1809年泊松提出了泊松括号)，海森堡论文中的色散关系与傅里叶变换，当然还有狄拉克所作的近似。愚以为，可以理解为狄拉克就是想建立起$\xi\eta-\eta\xi$的量子表达式。

在《量子力学原理》一书中，狄拉克提供了关于对易式的另一种推导。假设量子泊松括号(quantum P. B.)满足泊松括号所有的条件，这些条件足以唯一地决定量子泊松括号的形式，只是要注意因子的顺序。用两种不同路径计算括号$[u_1u_2,v_1v_2]$，$[u_1u_2,v_1v_2]=[u_1,v_1v_2]u_2+u_1[u_2,v_1v_2]$，$[u_1u_2,v_1v_2]=v_1[u_1u_2,v_2]+[u_1u_2,v_1]v_2$，两者相等，得：

$$[u_1,v_1](u_2v_2-v_2u_2)=(u_1v_1-v_1u_1)[u_2,v_2].$$

这样必然要求$(u_1v_1-v_1u_1)=\mathrm{i}\hbar[u_1,v_1]$，$(u_2v_2-v_2u_2)=\mathrm{i}\hbar[u_2,v_2]$。系数$\hbar$满足了等式对量纲的要求，而i就是量子力学中$\xi\eta-\eta\xi$形式的关系所要求的。这样，对任意的两个变量$u,v$，量子泊松括号$[u,v]$满足关系：

$$(uv-vu)=\mathrm{i}\hbar[u,v].$$

狄拉克假设量子泊松括号和经典泊松括号取值相同，即对坐标和动量，有括号$[q_r,q_s]=0$，$[p_r,p_s]=0$，$[q_r,p_s]=\delta_{rs}$。于是得到关于坐标和动量之间的关系：

$q_rq_s-q_sq_r=0$，$p_rp_s-p_sp_r=0$，$q_rp_s-p_sq_r=\mathrm{i}\hbar\delta_{rs}$.

此为fundamental quantum conditions。基本量子条件以及关系$(uv-vu)=\mathrm{i}\hbar[u,v]$提供了类比经典力学与量子力学的基础。这是构造量子力学的方法论基础。

在第五节中，狄拉克要推导一些独立于量子条件假设的结果。经典运动方程为$\dot{p}_r=[p_r,H]$，$\dot{q}_r=[q_r,H]$，在量子论中也可以要求其成立。对任意的变量x，量子论的$\dot{x}=[x,H]$成立。这样，若$[A,H]=0$，则A为运动方程的积分(常量)。若A_1,A_2为运动方程的积分，则$[A_1,A_2]$也是。

在经典力学中，可以引入同作用—角变量{狄拉克此处称它们是uniformizing variables. 译为一致化变量？}J_r,w_r相联系的正则变量$\xi_r=(2\pi)^{-1/2}J_r^{1/2}\exp(2\pi\mathrm{i}w_r)$，$\eta_r=-\mathrm{i}(2\pi)^{-\frac{1}{2}}J_r^{\frac{1}{2}}\times\exp(-2\pi\mathrm{i}w_r)$。可以把这样的变量的存在看作是系统在量子论下是多周期系统的条件。

第六节讲述稳态。一个不随时间变换的量，必是个对角阵。对于稳态的描述，经典定律是成立的(the classical laws hold for the description of the stationary states)，特别地，能量是同样的J的函数。将运动方程应用于x和H，

$$x(nm)H(mm)-H(nn)x(nm)=\dot{x}(nm)\mathrm{i}h/2\pi$$
$$=-\omega(nm)x(nm)h/2\pi\ ,$$

此即$H(nn)-H(mm)=h/2\pi\omega(nm)$，也就是玻尔条件。

将量子条件用于ξ_r,η_r，$\xi_r\eta_r(nn)-\eta_r\xi_r(nn)=\mathrm{i}h/2\pi[\xi_r,\eta_r]=\mathrm{i}h/2\pi$，结合$\xi_r\eta_r(nn)=\xi_r(nm)\eta_r(mn)=\eta_r(mn)\xi_r(nm)=\eta_r\xi_r(mm)$，可认为解为

$$\xi_r\eta_r(nn)=-n_r\mathrm{i}h/2\pi+\text{const.}\ .$$

进一步地，从海森堡的假设有负的n_r，m_r时振幅$C(nm)$恒为0，则可以取$\xi_r\eta_r(nn)=-n_r\mathrm{i}h/2\pi$。这样，$\frac{1}{2}(\xi_r\eta_r+\eta_r\xi_r)=-\mathrm{i}/2\pi J_r$，其中$J_r=(n+1/2)h$。这表明在玻尔理论中如欲得到正确的频率

一般会涉及半量子数。

读狄拉克这篇论文时笔者的感受是，他叙述的语气跟自然真有那么回事儿似的。也许是他积攒的大量数学知识让他每一步都走得很从容，觉得就该是那样的。笔者曾在《量子力学原理》一书的扉页上写下过读后的困惑："他是怎么具有指点这抽象江山的气度的？"1925年的狄拉克才23岁啊。

2.2　量子理论——狄拉克统计

狄拉克 1926 年的 On the theory quantum mechanics一文是波动力学发展的重要环节(收稿日期为1926年8月26日，此时薛定谔的分四部分的"量子化作为本征值问题"一文还没发表完)。此文中，狄拉克得到了狄拉克统计，发展了量子版的扰动理论，推导了爱因斯坦的辐射系数。

描述动力学系统的变量不满足乘法交换律，而是要满足某些量子条件。只要知道变量满足的代数律而无需了解变量的其他性质就可以构造理论，且如果动力学系统存在uniformising variables集就能把描述系统的变量表示成矩阵。但是，对于多电子系统不存在uniformising variables集，这条路走不通。

薛定谔把原子系统用波表示，从变分原理得到波函数ψ应满足的方程。波方程与哈密顿方程$H(q_r,p_r)-W=0$密切联系，形式为

$$\left\{H\left(q_r,\mathrm{i}h\frac{\partial}{\partial q_r}\right)-W\right\}\psi=0\ .$$

{对这两句不了解的读者，请参详经典力学里Hamilton—Jacobi方程的相关内容}参数W的值让连续、单值、有界的解ψ存在。当方程的解已知，可以得到满足量子条件的q_r,p_r的矩阵。由此建立起矩阵力学同薛定谔波动力学之间的数学等价性。狄拉克从稍不同的观点考察薛定谔的理论，将时间t及其共轭动量$-W$从一开始就和其他变量同等对待{这还是经典力学本就有的内容}。

根据薛定谔的理论，q_r,t都是不同的数学变量，而p_r,W是算符，$p_r=-\mathrm{i}h\frac{\partial}{\partial q_r}$，$-W=-\mathrm{i}h\frac{\partial}{\partial t}$。引入了这样的量以后，要注意如果$a=b$，会有$Xa=Xb$成立，但$aX=bX$未必成立。如果$Xa=Xb$和$aX=bX$都成立，则$a=b$成为identity (恒等)。假设方程$xy-yx=\mathrm{i}h[x,y]$以及运动方程都是identity {感觉这个强调应加入一般的量子力学教科书}。

一个动力学系统由哈密顿方程$H(q_r,p_r)-W=0$所表征，或者更一般地由方程$F(q_r,p_r;t,W)=0$所表征，则动力学变量x的运动方程为$\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}s}=[x,F]$，其中的变量$s$取决于函数$F$的形式，对应$H(q_r,p_r)-W=0$，它就是时间$t$。根据新理论，考察方程：

$$F\psi=0\ ,$$

因为是线性的方程，通解可表示为$\psi=\sum c_n\psi_n$，其中ψ_n是一组独立的特解，称为本征函数。若a是系统的积分常数，即有$[a,F]=0$，这样就有$Fa\psi_n=aF\psi_n=0$，故$a\psi_n$也是方程的解，可以有展开形式$a\psi_n=\sum_m\psi_m a_{mn}$，矩阵$a_{mn}$可看作变量$a$的表示。

矩阵表示不是唯一的。可以选择表示动力学系统的某个积分常数之矩阵为对角阵。比如，若哈密顿量不显含t，则W是系统的常数，即能量。令$W\psi=W_n\psi_n$，则对于不显含时间t的变量x，$x\psi_n=\sum_m\psi_m x_{mn}$，其中$x_{mn}=x_{mn}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(W_m-W_n)t/h}$。证明如下。

$$W x\psi_n=\sum_m W x_{mn}\psi_m=\sum_m(Wx_{mn}-x_{mn}W)\psi_m+$$

$$\sum_m x_{mn}W\psi_m=\sum_m \mathrm{i}h\dot{x}_{mn}\psi_m+\sum_m x_{mn}W_m\psi_m,$$

$$Wx\psi_n=xW\psi_n=W_n x\psi_n=W_n\sum_m\psi_m x_{mn},$$

于是有$\mathrm{i}h\dot{x}_{mn}=x_{mn}(W_n-W_m)$，解得$x_{mn}=x_{mn}\times\mathrm{e}^{\mathrm{i}(W_m-W_n)t/h}$。可能常矩阵对系统运动积分的表示比矩阵元为函数的矩阵对变化量的表示更重要(more fundamental)。

考察一两电子原子，其一电子处于轨道m，另一电子处于轨道n。那么，物理上不可分辨的状态(nm)与(mn)是算作两个不同状态还是一个状态？也就是说在表示矩阵中是带来两行两列还是就是一行一列呢？在前一种情形，那就可以分

别计算跃迁$(mn)\to(m'n')$和$(mn)\to(n'm')$的强度，然而这两个跃迁又是物理不可区分的，只有两者之和才能在实验上被确定。为了保持理论之只能计算可观测量的根本特性 (in order to keep the essential characteristic of the theory that it shall enable one to calculate only observable quantities)，我们还是选择将(nm)与(mn)算作一个态。

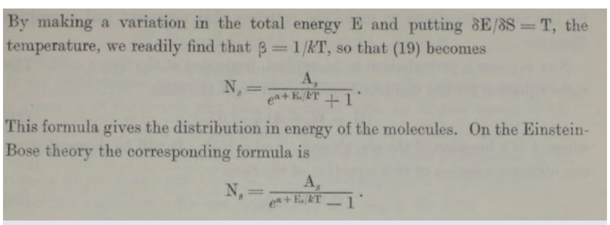
如果忽略电子间的相互作用，则整个原子的本征函数可以简单地当作单个电子单独存在于原子中的本征函数之积，记为$\psi_m(1)\psi_n(2)$。为了让矩阵中只有一行一列对应(nm)与(mn)两者，我们应该找到如下形式的本征函数集：

$$\psi_{mn}=a_{mn}\psi_m(1)\psi_n(2)+b_{mn}\psi_m(2)\psi_n(1)\ .$$

该集合中只有一个ψ_{mn}对应(nm)与(mn)两者，且能得到表示关于两电子之对称函数A的矩阵表示，形式为$A\psi_{mn}=\sum_{m'n'}A_{m'n',mn}\psi_{m'n'}$。为了满足这个条件，有两种方式选择函数集$\psi_{mn}$，$a_{mn}=b_{mn}$，对称的；或者$a_{mn}=-b_{mn}$，反对称的。单独的对称函数集或单独的反对称性函数集提供了问题的完备解集。此结果可推广至任意电子数的情形。对称的，$\sum_{\alpha_1\cdots\alpha_r}\psi_{n_1}(\alpha_1)\psi_{n_2}(\alpha_2)\cdots\psi_{n_r}(\alpha_r)$；反对称的，形式为如下矩阵的determinantal form {或者直接叫determinant。我一直找不到一个合适的汉语词儿翻译determinant。这个词来自代数方程，翻译成矩阵值很不合适}：

$$\begin{vmatrix}\psi_{n_1}(1) & \psi_{n_1}(2) & \cdots\psi_{n_1}(r)\\ \psi_{n_2}(1) & \psi_{n_2}(2) & \cdots\psi_{n_2}(r)\\ \cdots & \cdots & \cdots\\ \psi_{n_r}(1) & \psi_{n_r}(2) & \cdots\psi_{n_r}(r)\end{vmatrix}.$$

如果计入电子间的相互作用，仍然有对称的和反对称的本征函数，只是不能是这么简单的形式。无论如何，单独对称的或者反对称的本征函数足以给出问题的完备解。{笔者不知道狄拉克这句表述的依据是什么}当有两个电子处于同一个轨道，反对称波函数为0，这正是泡利不相容原理所要求的。


By making a variation in the total energy E and putting $\delta E/\delta S = T$, the temperature, we readily find that $\beta = 1/kT$, so that (19) becomes

$$N_s=\frac{A_s}{e^{\alpha+E_s/kT}+1}.$$

This formula gives the distribution in energy of the molecules. On the Einstein-Bose theory the corresponding formula is

$$N_s=\frac{A_s}{e^{\alpha+E_s/kT}-1}.$$

图4 狄拉克On the Theory of Quantum Mechanics一文p.673上的截图

现在研究分子集合(assembly of molecules)的本征函数。引入新的假设，集合的所有稳态(每个用一个本征函数表示)具有同样的先验概率。如果问题的解是对称的，同一个波相联系的分子数的任何值都具有相同的先验概率，结果是爱因斯坦—玻色统计力学(Einstein—Bose statistical mechanics)，见于普朗克的黑体辐射分布律。另一方面，如果选取反对称本征函数的解，则同每一个波相联系的分子数为0或1，此适用于原子中的电子。

把波分成很多的集合，每个集合里的波同具有相同能量的分子相联系。设想在s-集合里有A_s个波，与之相联系有N_s个分子的分布概率由

$$W=\prod_s\frac{A_s!}{N_s!(A_s-N_s)!}$$

给出，在约束$N=\sum_s N_s$和$E=\sum_s N_sE_s$下求熵$S=k\log W$的极大，得到条件为$N_s=\dfrac{A_s}{e^{\alpha+\beta E_s}+1}$，此为后来的狄拉克分布(图4)。

容笔者补充两句。此处为得到统计分布公式，求极值时用到了拉格朗日乘子法，其中的α，β就是拉格朗日乘子，计算熵时用到了近似$\log N!\approx N\log N-N$。记住，这里的N引入时是整数，且数学要求N是大数时近似才成立。然而，在构造统计力学时，哪管N是整数还是实数，是大的数还是小的数甚至是微分小量，一概用$\log N!=N\log N-N$处理，十分粗暴。参阅拙著《黑体辐射》。

辐射问题可看作原子系统在电磁场下的受扰动问题。设未扰动体系的波方程为$(H-W)\psi=0$，通解为$\psi=\sum_n c_n\psi_n$，系数c_n是常数。我们假设ψ_n联系着原子的一个稳态。自时刻

$t=0$加入扰动，扰动体系的波方程为$(H-W+A)\psi=0$，可以得到解的形式为$\psi=\sum_n a_n\psi_n$，系数a_n是时间t的函数。由

$$0=\sum_n(H-W+A)a_n\psi_n$$
$$=\sum_n a_n(H-W+A)\psi_n-\mathrm{i}h\sum_n\dot{a}_n\psi_n\ ,$$

这里的H, A和a_n对易，而$Wa_n-a_nW=\mathrm{i}h\dot{a}_n$\{不理解为什么$A$和$a_n$对易。此处的智慧，是科学构造者要学习的\}，假设$A\psi_n=\sum_m A_{mn}\psi_m$，可得方程：

$$\mathrm{i}h\dot{a}_m=\sum_n a_nA_{mn}\ .$$

如果$N_m=a_na_n^*$是处于m-态的原子数目\{此处可见产生、湮灭算符的影子了\}，其运动方程为$\mathrm{i}h\dot{N}_m=\sum_n(a_nA_{mn}a_m^*-a_n^*A_{mn}a_m)$。

接下来，假设电磁场扰动的哈密顿量$A=\dot{\eta}\cdot k/c$，其中η是y方向上的总电极化，$(0, \kappa, 0, 0)$是矢势，一通假设后得到ΔN_m的变化表达式，$2\pi/3h^2c\ \{|c_n|^2-|c_m|^2\}\,|P_{nm}|^2I_v$，进而认定爱因斯坦的受激吸收和受激辐射的概率系数为$B_{n\to m}=B_{m\to n}=2\pi/3h^2c|P_{nm}|^2$。

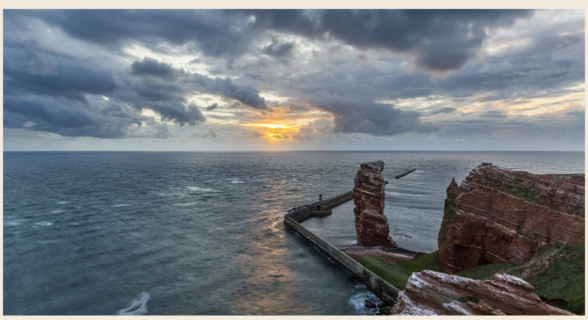
值得提一句，如同薛定谔在1926年的“量子化作为本征值问题”一文中的做法，狄拉克在这篇文章中也是在正文中说是“The new mechanics of the atom introduced by Heisenberg…”，在脚注中则是：“See various papers by Born, Heisenberg and Jordan”。这让后来的人读论文，可不就把建立量子力学的功劳记到了海森堡一个人的头上，这还不算记到海森堡头上到底合适不合适。

(未完待续)

悟理小言

100周年后，重返量子力学诞生地Helgoland

1925年6月中旬，海森伯在德国汉堡外海Helgoland小岛上，写下了催生“矩阵力学”的重要一步。几乎同时，奥地利物理学家薛定谔独立地以不同数学形式写下了“波动力学”方程式。两人使用的数学工具迥异，但殊途同归，他们(携手前辈和同侪)共同建立了“量子力学”学科。



“海天寥廓立多时”，这块礁岩可能就是当年海森伯一夜无眠写下矩阵力学后，振奋焦虑，望洋兴叹徘徊坐待旭日东升的海岬(图片引自*Physics World*，01 Dec.，2024)

2025年是量子力学诞生100周年。微观物理世界的本质，如物理实在性、古典与量子世界的界限等问题，仍然扑塑迷离，往往难以明确回答。但与过去截然不同的是，一个世纪以来科学与技术的发展，已让科学家能够有机会利用“实验”去检验及回答这类问题，而不再如过去一般，常只能局限于哲学层次的辩论。

第一次和第二次世界大战期间，Helgoland小岛被德军作为前哨要塞。二战末期，盟军摧毁了岛上大量的德军库存弹药，虽然房屋等建筑(包括海森伯在1925年停留两周的旅店)也因此被摧毁殆尽，但战后土地和财产又归还原主(岛民)。

2025年6月，一批科学家将重返Helgoland，讨论量子力学的本质、次原子世界的实在性、量子力学的技术应用，以及如何唤起公众对量子科学与技术的认识。联合国教科文组织将2025年订为“国际量子科学与技术年”(International Year of Quantum Science and Technology)。

(台湾阳明交通大学　林志忠　供稿)

狄拉克：The Eigentutor in the era of quantum mechanics (下)

曹则贤†

(中国科学院物理研究所　北京　100190)

2025－01－24收到

† email：zxcao@iphy.ac.cn

DOI：10.7693/wl20250206

CSTR：32040.14.wl20250206

(接54卷 第2期)

2.3　变换理论

狄拉克1927年The physical interpretation of the quantum dynamics一文(收稿日期1926年12月2日)的第三节The transformation equations被当作狄拉克变换理论的出处。解矩阵力学问题要求找到满足如下条件的表示动力学变量的矩阵方案：

(i) 量子条件$q_r p_r - p_r q_r = \mathrm{i}h$，等等；

(ii) 运动方程$gH - Hg = \mathrm{i}h\dot{g}$。如果算符$g$显含时间$t$，则是$gH - Hg + \mathrm{i}h\,\partial g/\partial t = \mathrm{i}h\dot{g}$；

(iii) 表示哈密顿量H的矩阵是对角的；

(iv) 表示实变量的矩阵是厄密的。

但是，矩阵方案不是唯一的。对矩阵g做正则变换，$G = bgb^{-1}$，b是任何矩阵，新矩阵G满足原来的所有代数关系，特别是量子条件(i)；如果b矩阵不是时间t的函数，$\dot{G} = b\dot{g}b^{-1}$，也就是满足运动方程。如果b矩阵与哈密顿量对易，那新的哈密顿量矩阵还是对角的。如果矩阵b，b^{-1}是转置共轭的，则对厄密的矩阵g，新矩阵G也是厄密的。矩阵G和矩阵g是同样好的对动力学变量的表示。接下来要得到只需满足条件(i)—(ii)的矩阵方案的一般变换理论。

方程$G = bgb^{-1}$可写为

$$G(\alpha'\alpha'') = \int b(\alpha'\alpha''')\mathrm{d}\alpha''' g(\alpha'''\alpha'''')\mathrm{d}\alpha'''' b^{-1}(\alpha''''\alpha'')$$

的形式。但是，(对于满足前述条件这事儿来说)新老矩阵之间没有行列的一一对应(There is thus no one-one correspondence between the rows and columns of the new matrices and those of the original matrices)，所以对变换可以换一种表示：

$$G(\xi'\xi'') = \int b(\xi'\alpha')\mathrm{d}\alpha' g(\alpha'\alpha'')\mathrm{d}\alpha'' b^{-1}(\alpha''\xi'')\ ,$$

以强调变换前后的矩阵不必要有行列的对应，参数(集合)ξ'与参数(集合)α'没有关系，它们可以有不同的取值范围，甚至一者是连续的，另者可以是分立的。

怎么为矩阵G的矩阵元针对每一个参数值ξ_r'赋值呢？合理的方式是找到变量ξ_1，ξ_2，$\cdots\xi_u$的那样的函数，其在新矩阵表示方案中是对角的，$\xi_r(\xi'\xi'') = \xi_r'\delta(\xi' - \xi'')$。变量$\xi_r$是系统的积分常数，因为其矩阵元不含时间$t$。它们必须是互相对易的，因为对角阵都是对易的。这样，变量ξ_r形成一个正则坐标集，且有相应的共轭动量集η_1，η_2，$\cdots\eta_u$。{就是一般教科书里要找到一组提供完备正交集的动力学变量问题。那些动力学变量在经典力学中都是系统的积分常数}。

矩阵b，b^{-1}满足关系$bb^{-1} = 1$，$b^{-1}b = 1$，即：

$$\int b(\xi'\alpha')\mathrm{d}\alpha' b^{-1}(\alpha'\xi'') = \delta(\xi' - \xi'')\ ,$$

$$\int b^{-1}(\alpha'\xi')\mathrm{d}\xi' b(\xi'\alpha'') = \delta(\alpha' - \alpha'')\ .$$

矩阵元$b(\xi'\alpha')$，$b^{-1}(\alpha'\xi')$形成了互相正交的归一化函数系。任何两个互相正交的归一化函数系定义了一个满足条件(i)—(ii)的到新矩阵方案的变换。如果$b(\xi'\alpha')$，$b^{-1}(\alpha'\xi')$是复共轭的，则新矩阵方案还满足条件(iv)。条件(iii)要求变量集ξ与哈密顿量H对易。因为变量集ξ是运动常数，因此必是正则变量q_r，p_r的不显含t的函数。两次正则变换的结果还是正则变换{后来，外尔和维格纳把群论引入了量子力学}。

变换理论现在一般称为Dirac—Jordan transformation theory，该理论被构造时尚没有希尔伯特空间的那套说辞。请把狄拉克的论文与如下约

当同时期的五篇论文一起参详：

P. Jordan, Über kanonische Transformationen in der Quantenmechanik (论量子力学中的正则变换), *Zeitschrift für Physik*, 37, 383—386(1926); II. *Zeitschrift für Physik*, 38, 513—517(1926).

P. Jordan, Über eine neue Begründung der Quantenmechanik (量子力学的新筑基), *Nachrichten von der Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Mathematisch-physikalische Klasse*, 161—169 (1926).

P. Jordan, Über eine neue Begründung der Quantenmechanik (量子力学的新筑基), *Zeitschrift für Physik*, 40, 809—838(1927); II, *Zeitschrift für Physik*, 44, 1—25(1927).

2.4 相对论量子力学

狄拉克引入相对论量子力学方程的文章The quantum theory of the electron，收稿日期是1928年1月2日。泡利引入泡利矩阵描述磁电子的那篇文章，收稿日期是1927年5月3日。狄拉克引用了泡利的这篇文章，以及Charles Galton Darwin, The electron as a vector wave, *Roy. Soc. Proc.*, A116, 227—253 (1927) 一文{此文的前驱是Charles Galton Darwin, The electron as a vector wave, *Nature* 119, 282—284 (1927)}。达尔文明确地指出电子的波函数应该是个矢量{是说波函数自身应该是个多分量的存在}，是量子力学发展过程中重要的一步。笔者识见短浅，没在中文语境中见到有人提及。

为了解释原子中的电子状态数目观察值是理论值两倍的“duplexity”现象，古德施密特与乌伦贝克提出了电子具有半量子和一个玻尔磁矩的自旋角动量。泡利和达尔文把这个模型纳入了理论，他们的理论关于类氢光谱在一阶近似上同实验吻合。为什么大自然为电子选择了这个特别的模型而不是简单的点电荷呢？人们倾向于在此前将量子力学应用于点电荷电子之上的方法中找到某种不完备的地方，当消除了不完备性，整个的“duplexity”现象会自然出现而无需引入随意的假设。我们发现确实是这样的，此前的理论同相对论，或者说同一般变换理论不符。同时满足相对论和一般变换理论的针对点电荷电子的简单哈密顿量能够无需额外假设就得到对现象的解释 (…the simplest Hamiltonian for a point-charge electron satisfying the requirements of both relativity and the general transformation theory leads to an explanation of all duplexity phenomena without further assumption)。

根据经典理论，电磁场中运动的电子其相对论哈密顿量为

$$F \equiv \left(\frac{W}{c}+\frac{e}{c}A_0\right)^2+\left(p+\frac{e}{c}A\right)^2+m^2c^2\ .$$

戈登(Walter Gordon，1893—1939)建议引入算符 $W = \mathrm{i}h\,\partial/\partial t$，$p_r = -\mathrm{i}h\,\partial/\partial x_r$，$r = 1, 2, 3$，将方程改造成量子理论的波方程：

$$F\psi \equiv \left[\left(\mathrm{i}h\,\partial/c\partial t+\frac{e}{c}A_0\right)^2+\sum_r\left(-\mathrm{i}h\,\partial/\partial x_r+\frac{e}{c}A_r\right)^2+m^2c^2\right]\psi=0\ .$$

此理论遭遇两个困难。一是诠释问题，此方程无法如非相对论量子力学那样诠释波函数。非相对论波函数的一般性诠释基于变换理论，波函数是方程$(H-W)\psi=0$的解，而方程关于W或者$\partial/\partial t$是线性的，因此任意时刻的波函数就决定了未来时刻的波函数。如果要求此关于波函数的诠释成立，则相对论量子论的波函数也必须关于W是线性的。戈登诠释的第二个困难在于当对方程取复共轭时，得到：

$$\left[\left(-\frac{W}{c}+\frac{e}{c}A_0\right)^2+\left(-p+\frac{e}{c}A\right)^2+m^2c^2\right]\psi=0\ ,$$

而这恰是用$-e$代替e的结果。因此可以说这个方程论及的是带电荷e和$-e$的电子。电荷为e的情形W取负值{注意，负能量不是来自$E^2=p^2c^2+m^2c^4$的开根号，而是来自方程的变换不变形式}。经典理论可以简单地将这样的解丢掉，但是量子论不行，因为扰动会引起W为正的态到W为负的态的跃迁。这样的跃迁对应实验上电荷突然从$-e$变为e，这种现象从未被观察到过。真正的相对

论波方程其解应该分裂成两个不搅合的集合(split up into two non-combining sets)，分别对应电荷$-e$和e。本文只考虑如何移除第一个困难。{笔者读各种转述量子力学的书，印象中似乎狄拉克一直纠结的是正能解、负能解的问题，而这里我们看到，从一开始狄拉克就注意到，当要考虑波函数及其共轭时，会有$-e$和e同时出现的问题。量子力学是什么时候认识到要同时同等地对待ψ^*的？}

现在要构造一个满足洛伦兹变换的量子力学方程，哈密顿量是关于$p_0=\dfrac{W}{c}=\mathrm{i}h\dfrac{\partial}{c\partial t}$线性的，而相对论要求$p_0,p_1,p_2,p_3$是对称的，因此方程有形式：

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

其中的算符$\alpha_1,\alpha_2,\alpha_3,\beta$与动量、坐标无关，且与它们都对易。此波函数应涉及更多的变量而不只是坐标。

由要求

$$(-p_0+\alpha_1 p_1+\alpha_2 p_2+\alpha_3 p_3+\beta)\times(p_0+\alpha_1 p_1+\alpha_2 p_2+\alpha_3 p_3+\beta)\psi=0$$

回到Klein—Gordon方程，记$\beta=\alpha_4 mc$，则得到条件：

$$\alpha_\mu{}^2=1,\ \alpha_\mu\alpha_\nu+\alpha_\nu\alpha_\mu=0,\ \mu,\ \nu=1,2,3,4\ .$$

泡利矩阵满足这样的条件，但是只有三个，也不可能找到第四个。狄拉克通过将泡利矩阵沿对角线扩展成4×4矩阵，仍记为$\sigma_1,\sigma_2,\sigma_3$，又把它们的第二、第三行对调，第二、第三列对调，得到了另外三个4×4矩阵ρ_1,ρ_2,ρ_3，具体表示如下：

$$\sigma_1=\begin{vmatrix}0&1&0&0\\1&0&0&0\\0&0&0&1\\0&0&1&0\end{vmatrix},\ \sigma_2=\begin{vmatrix}0&-\mathrm{i}&0&0\\\mathrm{i}&0&0&0\\0&0&0&-\mathrm{i}\\0&0&\mathrm{i}&0\end{vmatrix},$$

$$\sigma_3=\begin{vmatrix}1&0&0&0\\0&-1&0&0\\0&0&1&0\\0&0&0&-1\end{vmatrix};\ \rho_1=\begin{vmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&1\\1&0&0&0\\0&1&0&0\end{vmatrix},$$

$$\rho_2=\begin{vmatrix}0&0&-\mathrm{i}&0\\0&0&0&\mathrm{i}\\\mathrm{i}&0&0&0\\0&\mathrm{i}&0&0\end{vmatrix},\ \rho_3=\begin{vmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{vmatrix}.$$

方程写成了如下形式，$(p_0+\rho_1(\sigma,p)+\rho_3 mc)\psi=0$。{引入的6个矩阵，其中的$\rho_2$没用到，有点儿丑陋。}记$p_0=\mathrm{i}p_4$，$\rho_3=\gamma_4$，$\rho_2\sigma_r=\gamma_r$，$r=1,2,3$，方程可写为紧致的形式(图5)：

$$\left[\mathrm{i}\sum_\mu\gamma_\mu p_\mu+mc\right]\psi=0\ .$$

容易证明该方程是洛伦兹变换不变的。

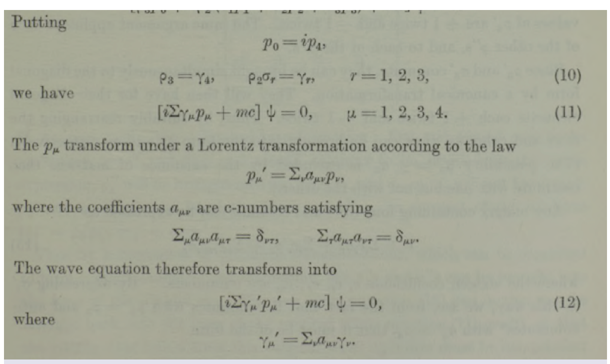
对上述方程加入电磁势，研究方程$F^*F\psi=0$，结果会发现比此前多出了两项$\dfrac{eh}{c}(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{H})+\dfrac{\mathrm{i}eh}{c}\varrho_1(\boldsymbol{\sigma},\boldsymbol{E})$，前一项除以$2m$，就是新自由度带来的磁矩与磁场的作用，而第二项可以解释为新自由度带来的电极矩与电场的作用，但它是虚的。作为出发点的方程$F\psi=0$是实的，这虚的项应该是在$F^*F\psi=0$操作中溜进来的，它可能没有物理意义。{拿没有物理意义的一些噱头持续装模做样地讨论，是后来的物理学研究范式之一。}

令$A=0$，$\dfrac{e}{c}A_0=V(r)$，可研究电子在中心势下的运动，哈密顿量为

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

现在研究波方程$F\psi=0$的周期解，这意思是将p_0当作一个参数而不是算符。轨道角动量$\boldsymbol{m}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$，其与$r,p_r$对易，$\boldsymbol{mF}-\boldsymbol{Fm}=\mathrm{i}h\rho_1\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{p}$。同时，$\boldsymbol{\sigma F}-\boldsymbol{F\sigma}=-2\mathrm{i}h\rho_1\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{p}$，可见有$\left(\boldsymbol{m}+\dfrac{1}{2}h\boldsymbol{\sigma}\right)\boldsymbol{F}-\boldsymbol{F}\left(\boldsymbol{m}+\dfrac{1}{2}h\boldsymbol{\sigma}\right)=0$，也即$\left(\boldsymbol{m}+\dfrac{1}{2}h\boldsymbol{\sigma}\right)$是运动常数。这可以解释为电子具有自旋角动量。

记$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{m}+\dfrac{1}{2}h\boldsymbol{\sigma}$，这个$\boldsymbol{M}$和经典的角动量


Putting

$$p_0=ip_4,$$

$$\rho_3=\gamma_4,\quad \rho_2\sigma_r=\gamma_r,\quad r=1,2,3,\qquad(10)$$

we have

$$[i\Sigma\gamma_\mu p_\mu+mc]\,\psi=0,\quad \mu=1,2,3,4.\qquad(11)$$

The p_μ transform under a Lorentz transformation according to the law

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

where the coefficients $a_{\mu\nu}$ are c-numbers satisfying

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

The wave equation therefore transforms into

$$[i\Sigma\gamma_\mu' p_\mu'+mc]\,\psi=0,\qquad(12)$$

where

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

图5 狄拉克The quantum theory of the electron一文p.615上的截图

$\boldsymbol{m}=\boldsymbol{x}\times\boldsymbol{p}$ 有相同的对易关系，$\boldsymbol{M}\times\boldsymbol{M}=\mathrm{i}h\boldsymbol{M}$ {对易式简记，别理解为矢量叉乘}，$\boldsymbol{M}^2\boldsymbol{M}_3=\boldsymbol{M}_3\boldsymbol{M}^2$。周期解，要求 M_3 必须是半整数(m_3 是整数)，若记 $M^2=\left(j^2-\frac{1}{2}\frac{1}{2}\right)h^2$，则 M_3 取值范围 $(j-1/2)h$ 到 $(-j+1/2)h$。因为 j 的特征值为正整数和负整数，因此(相对论修正的薛定谔)方程会有双倍的能级(Since j has, from its definition, both positive and negative integral characteristic values, our equation will give twice as many energy levels when the last term is not neglected)。这解决了困扰多年的“duplexity”现象。

狄拉克紧接着又发表了这篇文章的部分II，收稿日期为2月2日。在这篇文章中，狄拉克就注意到了哈密顿量非厄密的情形(We shall first make a slight generalisation of the usual interpretation of wave mechanics to apply to cases when the Hamiltonian is not Hermitian) {90多年后，哈密顿非厄密情形得到了关注}。接下来用他得到的方程研究了选择定则、多重态谱线的相对强度和塞曼效应，详情请参考原文。特别地，若动力学变量 $\boldsymbol{X}$ 与 $\boldsymbol{j}$ 反对易，$\boldsymbol{jX}+\boldsymbol{Xj}=0$ 的矩阵形式为 $j'X(j'j'')+X(j'j'')j''=0$，则仅当 $j''=-j'$，$X(j'j'')\neq 0$。因此，选择定则为 $j\rightarrow -j$。如果是满足条件 $[[\boldsymbol{Y},jh],jh]=-\boldsymbol{Y}$ 的动力学变量 $\boldsymbol{Y}$ {此关系来处见狄拉克1926}，除非当 $(j''-j')^2=1$，否则应有 $Y(j'j'')=0$，因此选择定则是 $j\rightarrow j\pm 1$.

狄拉克的相对论量子力学方程引起了外尔(Hermann Weyl，1885—1955)的注意。外尔1929年发文讨论了负能解的数学含义[Hermann Weyl, Gravitation and the Electron, *PNAS* 15(4), 323—334 (1929)]，这篇文章一般是当作规范场论的奠基性工作。1930年，狄拉克发表了三篇关于“电子与质子”的文章(见前面的文章列表)，把负能解归于质子，或者认为物理世界中那些负能态是占据态，正能态的电子不会落入负能态。1930年，奥本海默发文强烈反对狄拉克的负能电子是质子的提议 [J. R. Oppenheimer, Note on the Theory of the Interaction of Field and Matter, *Physical Review* 35 (5), 461—477 (1930)]，指出如果是这样，氢原子会迅速自毁(rapidly self-destruct)。奥本海默关于如果质子是狄拉克方程负能解对应的粒子，就想到了氢原子的迅速自毁，不知道这和多年以后他成了第一个研究原子核毁灭力量工程的首席科学家是否有关系。1930年谈论电子—质子毁灭的还有狄拉克自己的文章以及一篇塔姆的文章[Igor Tamm, Über die Wechselwirkung der freien Elektronen mit der Strahlung nach der Diracschen Theorie des Elektrons und nach der Quantenelektrodynamik (基于狄拉克的电子理论和量子电动力学论自由电子与辐射间的相互作用)，*Zeitschrift für Physik* 62, 545—568(1930)]。诠释狄拉克理论关键的一步出现在1931年，外尔认为所谓的负能电子必须和正能电子具有同样的质量，见于*Quantenmechanik und Gruppentheorie* (量子力学与群论)一书第二版p.200 (全书共366页。第一版出现于1928年)，原句为“那个拥有电子质量 m，电荷是 $-e$ 而非 $+e$ 的(大自然里未出现的)粒子可称为‘正的电子’。如上可知，正的电子的能级是 $-h\nu$，与此同时负电子的是 $h\nu$。抛开符号不论，两种粒子的行为相同 [Das (in der Natur nicht vorkommende) Teilchen von der Elektronenmasse m, dessen Ladung nicht $-e$, sondern $+e$ ist, werde als ‘positives Elektron’ bezeichnet. Man erkennt aus dem Gesagten, daß die Energieniveaus des positiven Elektrons $-h\nu$ sind, wenn hv diejenigen des negativen Elektrons sind. Abgesehen vom Vorzeichen verhalten sich beide Sorten von Teilchen Gleich]”。所谓“Weyl proposed that a ‘hole’ in the Dirac sea…”，笔者在外尔的书里还没找到证据。狄拉克引用时指向了该书的234页，那应该是这一句：“她(大自然)有必要赋予质子与电子同样的质量 (Denn sie verleiht notwendig dem Proton die gleiche Masse wie dem Elektron)”。{很多文献会不负责任地指向外尔1927年的论文[Hermann Weyl, Quantenmechanik und Gruppentheorie, *Zeitschrift für Physik* 46(1-2), 1—46 (1927)]。此外，把所谓的0质量狄拉克方程安到外尔的头上，也是找不到原始文献。}最终，在1931年，狄拉克在Quantised singularities in the electromagnetic field一文里指出解量子力学的相对论表述需要对基本概念做根本性的修正(more drastic revision of our fundamental concepts)。相对论量子力学预言的电子的负动能态被归于一种具有同电子一样的质量但电荷相反的新粒子，狄拉克称之为反电子(anti-electron)，并断言当反电子与电子接触时会发生湮灭 (annihilation)。因为同电子的极速复合 (on account of their rapid rate of recombination with electrons)，不能指望在自然中观察到反电子，但如果能在真空中实验产生反电子，它们会是相当稳定的，可以被观察到的。两个(束？)硬γ射线相遇会导致电子—反电子的同时产生(An encounter between two hard γ-rays could lead to the creation simultaneously of an electron and anti-electron)。质子与电子没有关系，或许有自己的负能态，一般来说也都是占据的，未占据的态以反质子的面目出现(Presumably the protons will have their own negative-energy states, all of which normally are occupied, an unoccupied one appearing as an anti-proton)。当前的理论无法提供理由说明为什么电子和质子之间要有区别。{这一段似乎已经有了产生—湮灭算符的萌芽了。阅读这一段时，笔者的感受是，尽管放心大胆地预言，总有一些是对的，一些是错的。如果搁在当今时代发个文章非得经过所谓的审稿人同意，狄拉克的那些预言可能都得胎死腹中。}

狄拉克1931年的Quantised singularities in the electromagnetic field一文最酷的地方是揭示了一种电与磁的对称性(a symmetry between electricity and magnetism)，没有这个对称性，hc/e^2的值是不定的。不管相对论不相对论，波函数形式为$\psi = Ae^{i\gamma}$，归一化的ψ会留一下一个不确定性，即相位γ可以有一个可加常数的自由度。空间点上γ值没意义，但两点上γ的差才有意义。可以假设γ在空间点上没有定值但在两点之间有确定的差。进一步假设这个差只当两点是近邻时才有定值。对于远隔的两点，沿确定的连结两点的曲线才有确定的相位差，不同的曲线一般会给出不同的相位差。这就是说，沿闭合曲线绕一圈的相位差不必为零。这个相位的不可积如果在量子理论的应用中不造成含混，条件该是什么呢？

考察两个不同波函数积的积分，$\int \phi_m \psi_n \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z$，其模平方的物理意义是两个状态契合的概率(probability of agreement of the two states){纯从数学层面来说，就是函数的交叠积分}。若使积分有确定的模，积分函数必须在两点间，不管远近，有确定的相位差。也就是说$\phi_m\psi_n$沿闭合曲线绕一圈的相位差必为零。这样，ψ_n沿闭合曲线绕一圈的相位差与ϕ_m的相等但符号相反，因此与ψ_m的相等{ϕ_m在积分中应理解为取复共轭的}。因此有结论，所有波函数沿任何闭合曲线的相位变化必是相同的(The change in phase of a wave function round any closed curve must be the same for all the wave functions)。这个条件也扩展到变换函数与观测量矩阵表示上{矩阵力学的习惯性简写让很多人忘了或者根本不知道矩阵表示还有一个省略的相因子！}，量子力学的所有操作都可以尽管进行仿佛相位不存在不确定性一样 (all the general operations of quantum mechanics can be carried through exactly as though there were no uncertainty in the phase at all)。{比较一下狄拉克讨论的量子力学uncertainty与海森堡讨论的量子力学uncertainty。基于严谨数学的量子力学讨论就不如天马行空的讨论讨大众科学家喜欢}。

既然所有波函数绕任何闭合路径一圈经历的相位变换是一样的，它就与系统的状态无关而可能是由动力学系统决定的。相位的不可积与粒子所处的力场相关联。把波函数表示为$\psi = \psi_1 e^{i\beta}$，波函数ψ_1在各点上有确定的相位，这样相位不确定性都体现在因子$e^{i\beta}$中。β在空间点上没有确定的值，但其导数，$k_x = \frac{\partial\beta}{\partial x}$，$k_y = \frac{\partial\beta}{\partial y}$，$k_z = \frac{\partial\beta}{\partial z}$，$k_t = \frac{\partial\beta}{\partial t}$，须有确定的值。相应的Stokes定理为$\int \boldsymbol{k}\cdot \mathrm{d}\boldsymbol{l} = \nabla\times\boldsymbol{k}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{S}$，其中d$l$ (4-vector)是线元而dS (6-vector)是边界为前述闭合曲线之曲面的面元。由$\psi = \psi_1 e^{i\beta}$，有$-\mathrm{i}h\frac{\partial}{\partial x}\psi = e^{i\beta}\left(-\mathrm{i}h\frac{\partial}{\partial x} + hk_x\right)\psi_1$，可

见如果ψ满足含有动量算符p和能量算符W的波方程，则ψ_1满足含有动量算符$p + hk$和能量算符$W - hk_0$的波方程{对于固体中的电子来说，原子实的振动和外加电磁场一样是外场，固体物理教科书会照抄这个做法，但不交代来处}。假设ψ是自由粒子的波函数，则ψ_1对应电荷在势为$A = \frac{hc}{e}k$，$A_0 = -\frac{h}{e}k_0$的电磁场下的波方程，ψ_1是具有确定相位的波函数。可见，有没有外场都必须有满足同样波方程的波函数ψ，而外场的整个效果就是让相位不可积 (We see that we must have the wave function 4 always satisfying the same wave equation, whether there is a field or not, and the whole effect of the field when there is one is in making the phase non-integrable)。把 6-vector 的$\nabla \times k$等同于电磁场，若把4-vector 的k改成$(k; k_0)$的记号，则有$\nabla \times k = \frac{e}{hc}H$，$\nabla k - \frac{\partial}{\partial t}k = \frac{e}{h}E$。这里的相位不可积与电磁场的联系不是啥新鲜事儿，就是外尔的规范不变性原理。{把外尔1918年谈论电与引力的论文，1922年薛定谔挽救外尔理论的论文，以及1926年福克把电磁场规范变换同波函数联系起来的论文一起参详，就能更好地理解狄拉克的这篇论文。参见拙著《云端脚下》。}

不可积的相位导数可以诠释为电磁势，这也没什么新内容。然而，相位总有一个2π任意整数倍的不确定性，从这个角度考虑，则相位导数与电磁势的联系应该带来新的物理现象。前面提及的条件要放宽一些，绕闭合曲线一圈带来的相位改变对于不同的波函数可以相差2π的任意整数倍，因此相位(导数)直接用电磁场诠释不是那么确定的(not sufficiently definite)。

因为波函数是连续的，不同波函数绕一个小的闭合曲线的相位变化不能相差2π整数倍，而必须是一个确定的值，那它的用6-vector电磁场之通量的诠释就没有含混的余地。但是，有个例外，即波函数为零的情形，这时相位没有意义。(复)波函数一般来说是沿着一条线为0，这样的线称为节线(nodal line)。如果波函数有一条穿过小的闭合曲线的节线，基于连续性考量就不再能断言绕小的闭合曲线所引起的相位变换是小的了。我们能说的是相位变换接近某个$2\pi n$，其中的整数n是这条节线的特征，其正负正好表示闭合曲线绕节线的取向。(有节线的波函数)绕闭合曲线一圈的相位变化同最近的$2\pi n$之差与没有节线的波函数相位变化相同。因此，这个差才是要用6-vector电磁场诠释的。对于三维物理空间的闭合曲线，只有磁通量要考虑，因此绕小的闭合曲线造成的相位差可表示为$2\pi\sum n + \frac{e}{hc}\int H\cdot \mathrm{d}S$，这个表示分两部分，对于不同的波函数，差别在第一项$2\pi\sum n$。$2\pi\sum n + \frac{e}{hc}\int H\cdot \mathrm{d}S$是应用于积分表面之边界的，当应用于一个闭合曲面时，必为0。那么，如果$\sum n \neq 0$，则必有节线终结于闭合面的内部。$\sum n$就是终结于闭合面内部的节线数目。对所有波函数节线的终结点是相同的。这些节线的终结点就是电磁场的奇点。于是，在绕某终结点的磁通量为$4\pi\mu = 2\pi nhc/e$，也就是在终结点处有强度(strength)为$\mu = nhc/2e$的磁极(magnetic pole)。最后的结论是，当前的量子力学表述，自然地不可避免地导向这样的波方程，其唯一的诠释是电子在单个磁极的场中电子的运动 (wave equations whose only physical interpretation is the motion of an electron in the field of a single pole)。之所以观察不到孤立磁极，是因为符号相反的两个单量子极(one-quantum pole)之间的吸引为质子—电子间的电吸引的$\left(\frac{137}{2}\right)^2 = 4692.25$倍，所以不能分开。{狄拉克在这篇文章里的推导功夫，以及硬凑诠释的功夫都是一流的，有兴趣的读者可跟随作者自己推演一遍。他那时候想不到后来加速电子、质子能获得的能量远超那个时代能获得的能量值的4692.25倍。笔者不懂这里的内容后来怎么被理解为magnetic monopole的，故不予评论。}

2.5　量子力学表示

量子力学是一门需要新的数学加持的学科，狄拉克为量子力学的表述引入了一些非常有用的

数学工具。在1927年The physical interpretation of the quantum dynamics一文(收稿日期1926年12月2日)中，狄拉克引入了如今被称为狄拉克delta-函数的 $\delta(x)$。如果仅仅考虑到对于 $x \neq 0$，有 $\delta(x) \equiv 0$，$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1$ 这样的性质，这样的函数在狄拉克之前约100年就有了。爱因斯坦此前就用过这种函数表示量子化的态密度发展量子统计。狄拉克把 $\delta(x)$ 的性质挖掘往前推进了不少步，比如得出：

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\delta^{(n)}(x-a)\,\mathrm{d}x = f^{(n)}(a) \ ,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)\delta(x-b)\,\mathrm{d}x = \delta(a-b) \ ,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a)\,\mathrm{d}x \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-b)\,\mathrm{d}b = 1 \ ,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x-a)\delta(x-b)\,\mathrm{d}x = \delta'(a-b) \ ,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x-a)\delta^{(n)}(x-b)\,\mathrm{d}x = \delta^{(n+1)}(a-b) \ ,$$

等等。

很多文献都会说狄拉克在1927年的The quantum theory of the emission and absorption of radiation一文中引入了产生算符和湮灭算符，a^{+}, a，然而笔者在这篇文章里并没有发现蛛丝马迹。在John Avery所著的*Creation and annihilation operators* (McGraw-Hill，1976)一书中，还把产生算符和湮灭算符的引入归于P. Jordan, O. Klein, Zum Mehrkörperproblem der Quantentheorie (量子多体问题), *Zeitschrift für Physik* 45, 751—765 (1927) (收稿日期为1927年10月4日) 和P. Jordan, E. Wigner, Über das Paulische Äquivalenzverbot (论泡利的等价禁制), *Zeitschrift für Physik* 47, 631 (1928) (收稿日期为1928年1月26日)这两篇文章。然而，虽然这两篇文章中都出现了类似 $b^{+}b$，$a^{+}(\beta')a(\beta'') + a(\beta')a^{+}(\beta'')$ 这样的表示，但都没有明确使用creation operator, annihilation operator (德语为Erzeugungsoperator, Vernichtungsoperator)的字样。在1928年的这篇中，有一句Entsprechend sollen sich $m_1^{+}, m_2^{+}, \cdots m_\rho^{+}$; $m_1^{-}, m_2^{-}, \cdots m_\sigma^{-}$ auf die nach dem Prozeß übriggebliebenen bzw. neu erzeugten Teilchen beziehen (相应地 $m_1^{+}, m_2^{+}, \cdots m_\rho^{+}$; $m_1^{-}, m_2^{-}, \cdots m_\sigma^{-}$ 应当表示此过程后留下的以及新产生的粒子)，似乎可以算作是引入了产生算符的证据。到底是谁在哪里明确地引入了产生算符 a^{+}、湮灭算符 a 并用于量子力学问题的讨论，笔者目前没有线索。{一个感慨，对二手文献一定要存疑。}

在1939年的A new notation for quantum mechanics一文中，狄拉克指出一个好的记号系统对于协助理论的发展具有极大的价值，可以让写下重要的量及其组合变得容易起来。张量分析中的求和规则就是一例。狄拉克为量子态引入了bra-ket notation，极大地方便了量子态的表示以及量子力学的计算推导。Bra-ket就是把英文bracket (括号) 一词儿拆成了两部分，bra表示 $\langle\ |$，ket表示 $|\ \rangle$(狄拉克的原文是<和>)，有人把它们汉译为左矢、右矢，凑合着用挺好 (还有刀矢、刃矢的译法，不知道是咋想的)。一般地，$|\ \rangle$ 对应波函数，比如记为 ψ，$\langle\ |$ 对应波函数 ψ 的复共轭 ψ^{*}。当然，bra-ket里面可以塞入波函数的名称或者就是状态的量子数，比如 $|\psi\rangle$，$\langle n|$，$|n, l, m; s\rangle$。进一步地，$\langle\phi|\psi\rangle = \int \phi^{*}(x)\psi(x)\,\mathrm{d}x$，而 $|\ \rangle\langle\ |$ 可理解为算符，$\sum_n |n\rangle\langle n| = I$ 表示状态集 $|n\rangle$ 的完备性。狄拉克评价自己的记号系统提供了一个利落、简明的书写方式，能够带来思想的统合(…leads to a unification of ideas)。

3 多余的话

1984年10月20日狄拉克辞世，一代理论物理巨星陨落。那时，笔者恰好刚开始上量子力学课，似乎没有获得关于狄拉克的任何信息。笔者的量子力学学得几近于无，除了笔者自己愚钝不知上进以外，还有一个可以大胆说出来的原因，那就是没见过创立量子力学的真神，没读过创立者们留下的真经。一般的原子物理和量子力学教科书，大体上都是天上一句地上一句，天知道它在说什么，学习者大概鲜有愉快的体验。好想知道老师是怎么把那课给糊弄过去的。我猜，一个

人如果能够得学问创造者亲炙，虽然未必就能学有所成，但多少应该开点儿窍。有不少谈论聆听狄拉克讲述量子力学(图6)感受的文章，不妨拿来读读找找感觉。对于绝大多数的大学来说，能有科学巨擘亲自站台授课那是妄想，作为补救之万一，愚以为，引导学子们在四年里至少装模做样地阅读科学巨擘原著一次具有重要的形式意义。此刻，可以说关于量子论、量子力学还有规范场论创生时期的原始论文笔者几乎都浏览了一遍(懂是不敢指望的)，回头再看一些关于原子物理和量子力学的表述，我大概能记起是谁在哪篇文章在什么语境下得到的，感觉原子物理和量子力学亲切多了。

狄拉克的《量子力学原理》是表述量子力学的经典，但也没有必要将之神话。对于经典物理和数学基础不够扎实的读者来说，把这本书当作入门读物未必合适。1930年的狄拉克，对物理的理解很深刻，但量子力学毕竟是在草创过程中，故狄拉克的著作也会有一些明显的不恰当表述。比如，他写道：“It is, however, more convenient to work with the momentum components instead of the velocity components”，经典力学从(x, v)表述转到(q, p)表述可不是方便不方便的问题，而是质的提升。动量p相较速度v之不同处在于纳入了运动物体的质量，那可是运动的主体。类似的不恰当表述还有不少。此外，我们也注意到狄拉克的表示理论混淆了状态与波函数，一些状态表示是有量

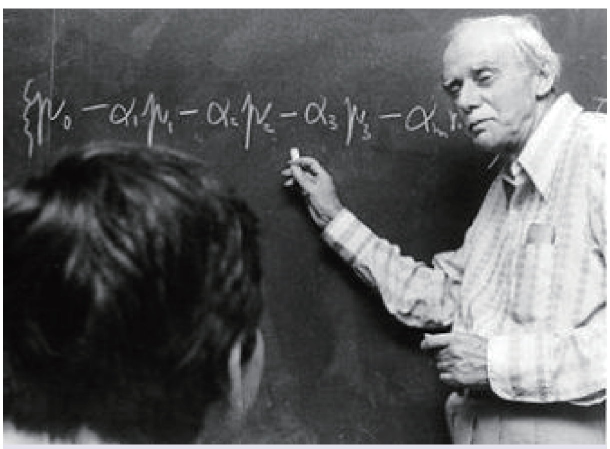


图6　晚年的狄拉克在讲解狄拉克方程。这张照片定义了什么才是合格的老师

纲的，带来了概念性的混乱。

狄拉克的量子力学和相对论表述都具有明显的数学倾向，他和约当是那种也被称为数学家的物理学家。与他们共轭的是庞加莱和外尔这类参与基础性物理创造的职业数学大家，而哈密顿、雅可比和冯·诺伊曼这样的则是数学、物理成就平分秋色的人物。到1923年获得数学专业的学士学位，狄拉克在布里斯托大学的学习时间满打满算不过四年，从1924年起他就能开始发表极具数学色彩的研究论文，我猜其在大学里可能学到了一些有思想的数学。数学，是一门思想的科学。那些宣称不用数学公式就能讲清楚物理的人，可能不知道数学不只是物理的表述语言，还是物理学的灵魂。

有人评论狄拉克，说这样伟大的人物都是仅关注极少事物的人，从不为不感兴趣的事情耽误功夫。Nevill Mott 在 Reminiscences of Paul Dirac (回忆狄拉克)一文中，说了这么一个故事。在剑桥，某天午餐时，某人问狄拉克在忙乎什么。狄拉克反问，你知道什么是非渡越变量吗 (do you know what adiabatic invariants are?)，问的人说不知道哇。狄拉克说，“如果对一个主题的要素你一无所知，那我跟你聊有啥用呢 (What, then, is the use of my talking to you if you don’t know the very elements of the subject)?”狄拉克的态度是对的。再者，就学问自身而言，如果一个人对经典力学的哈密顿正则方程，哈密顿—雅可比方程，正则共轭变量，正则变换，泊松括号，作用-角变量，积分常数，特征函数，多周期解，非渡越变量等等基本概念不甚了了，那他学习量子力学除了能记住几句装神弄鬼的论断还能学到啥?

狄拉克是英国人，从他后来的论文或许可作如下大胆的推测，他在大学期间就深得牛顿、哈密顿、麦克斯韦精神之真传。狄拉克是说法语的移民之子，其父就要求狄拉克兄弟小时候要说严谨的法语，或许他的数学、物理学习也深受法国思想家如拉格朗日的影响。一个人若能是拉格朗日和哈密顿的精神嫡传弟子，那构造起量子力学得心应手就是可理解的。狄拉克能写优雅的法语

文章是天经地义的，让笔者惊讶的是他的德语论文，笔者眼拙，看不出和约当、泡利的德语论文有什么区别。此处撷取“论碰撞过程的量子力学”一文的摘要，能阅读德语的朋友可自行评价。Die Wellengleichung der Quantenmechanik für Stoßvorgänge wird in Impulsveränderlichen gelöst. Die Streuungswahrscheinlichkeit und die Ausbeutefunktion ergeben sich dann durch eine Untersuchung der Singularitätsstellen der Wellenfunktion. Die Methode, angewandt auf den Fall, wo das stoßende Teilchen absorbiert werden kann, liefert die Breite einer Absorptionslinie [(本文)用动量表示求解关于碰撞过程的量子力学波方程。散射概率和传播函数可通过对波函数奇点的研究得到。用于碰撞粒子被吸收情形的方法能得出吸收线的宽度]。

顺便说一句，狄拉克著述颇丰且亲自授课，但他是个沉默寡言的人。他不仅让自己的名字同一个伟大的方程甚至一个伟大的时代相联系，他还把自己的名字活成了一个非物理学单位，1狄拉克等于每小时说一个词。

参考文献

[1] van der Waerden B L. Sources of Quantum Mechanics. Dover Publications，1968

[2] Farmelo G. The Strangest Man: The Hidden Life of Paul Dirac, Quantum Genius. Faber and Faber，2009

[3] Helge K. Methodology and Philosophy of Science in Paul Dirac's Physics. Roskilde，1979

[4] Helge K. Dirac: A Scientific Biography. Cambridge University Press，1990

[5] Kursunoglu B N. Wigner E (eds.). Reminiscences about a Great Physicist: Paul Adrien Maurice Dirac. Cambridge University Press，1987

[6] Abraham P，Jacob M，Goddard P *et al* (eds.). Paul Dirac: The Man and His Work. Cambridge University Press，1998

[7] Beebe N H F (ed.). A Selected Bibliography of Publications by and about Paul Adrien Maurice Dirac. Utah University，2022

[8] Fushchich N. Symmetry of Equations of Quantum Mechanics. Allerton Press，1994

[9] Close F. Nature，2009，459：326

[10] 汪克林，曹则贤. 物理，2024，53(3)：168

[11] 汪克林，曹则贤. 物理，2024，53(7)：472