

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: zxciao@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20250310

CSTR: 32040.14.wl20250310

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

$$G(a'a'') = \int b(a'a''') da''' g(a'''a''''') da'''''' b^{-1}(a''''''a'')$$

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:

$$G(\xi'\xi'') = \int b(\xi'a') da' g(a'a'') da'' b^{-1}(a''\xi'') ,$$

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) a' 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 $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_u$ 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 ξ_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 $\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_u$ 。{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:

$$\int b(\xi'a') da' b^{-1}(a'\xi'') = \delta(\xi' - \xi'') ,$$

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

矩阵元 $b(\xi'a')$, $b^{-1}(a'\xi')$ 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 $b(\xi'a')$, $b^{-1}(a'\xi')$ 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

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

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

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

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 $\frac{\partial}{\partial t}$ 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:

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

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 $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ 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 $p_0 = \frac{W}{c} = i\hbar \frac{\partial}{c\partial t}$ 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:

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

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

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

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 ρ_2 没用到, 有点儿丑陋。}记 $p_0 = ip_4, \rho_3 = \gamma_4, \rho_2 \sigma_r = \gamma_r, r = 1, 2, 3$, 方程可写为紧致形式(图5):

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

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 $\frac{eh}{c}(\sigma, H) + \frac{ieh}{c} \varrho_1(\sigma, E)$, 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 $A = 0, \frac{e}{c} A_0 = V(r)$, 可研究电子在中心

势下的运动, 哈密顿量为

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

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 $m = x \times p$, 其与 r, p_r 对易, $mF - Fm = i\hbar \rho_1 \sigma \times p$ 。同时, $\sigma F - F\sigma = -2i\hbar \rho_1 \sigma \times p$, 可见有 $\left(m + \frac{1}{2} \hbar \sigma\right) F - F \left(m + \frac{1}{2} \hbar \sigma\right) = 0$, 也即 $\left(m + \frac{1}{2} \hbar \sigma\right)$ 是运动常数。这可以解释为电子具有自旋角动量。

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

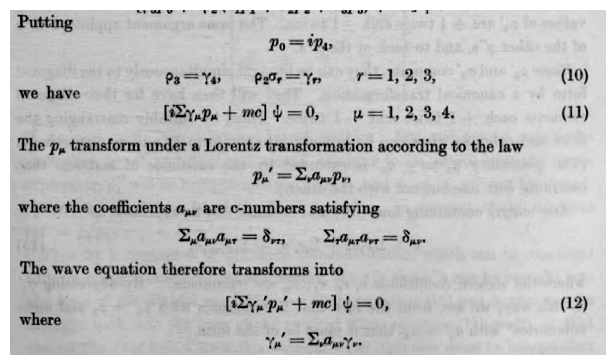


图5 狄拉克 The quantum theory of the electron 一文 p.615 上的截图

$\mathbf{m} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$ 有相同的对易关系, $\mathbf{M} \times \mathbf{M} = i\hbar \mathbf{M}$ {对易式简记, 别理解为矢量叉乘}, $\mathbf{M}^2 \mathbf{M}_3 = \mathbf{M}_3 \mathbf{M}^2$ 。周期解, 要求 M_3 必须是半整数 (m_3 是整数), 若记 $M^2 = \left(j^2 - \frac{1}{2}\right) \hbar^2$, 则 M_3 取值范围 $(j - 1/2)\hbar$ 到 $(-j + 1/2)\hbar$ 。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 $\mathbf{X}$ 与 $\mathbf{j}$ 反对易, $\mathbf{j}\mathbf{X} + \mathbf{X}\mathbf{j} = 0$ 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 $[[Y, j\hbar], j\hbar] = -Y$ 的动力学变量 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 $-\hbar\nu$, 与此同时负电子的是 $\hbar\nu$ 。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 $-\hbar\nu$ sind, wenn $\hbar\nu$ 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， $\int \phi_m \psi_n dx dy dz$ ，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 $\int k \cdot d\ell = \nabla \times k \cdot dS$ ，其中 $d\ell$ (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 $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \psi = e^{i\beta} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \hbar k_x \right) \psi_1$ ，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 $p + \hbar k$ 和能量算符 $W - \hbar k_0$ 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 $A = \frac{\hbar c}{e} k$, $A_0 = -\frac{\hbar}{e} k_0$ 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 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 $\nabla \times k = \frac{e}{\hbar c} H$, $\nabla k - \frac{\partial}{\partial t} k = \frac{e}{\hbar} E$ 。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 $2\pi \sum n + \frac{e}{\hbar c} \int H \cdot dS$, 这个表示分两部分, 对于不同的波函数, 差别在第一项 $2\pi \sum n$ 。 $2\pi \sum n + \frac{e}{\hbar c} \int H \cdot dS$ 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 $4\pi\mu = 2\pi\hbar c/e$, 也就是在终结点处有强度(strength)为 $\mu = \hbar c/2e$ 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 $\delta(x) \equiv 0$, $\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1$ 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:

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} f(x) \delta^{(n)}(x-a) dx &= f^{(n)}(a), \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) \delta(x-b) dx &= \delta(a-b), \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-a) dx \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x-b) db &= 1, \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x-a) \delta(x-b) dx &= \delta'(a-b), \\ \int_{-\infty}^{\infty} \delta'(x-a) \delta^{(n)}(x-b) dx &= \delta^{(n+1)}(a-b),\end{aligned}$$

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 $m_1^+, m_2^+, \dots, m_p^+; m_1^-, m_2^-, \dots, m_o^-$ auf die nach dem Prozeß übriggebliebenen bzw. neu erzeug-

ten Teilchen beziehen (相应地 $m_1^+, m_2^+, \dots, m_p^+; m_1^-, m_2^-, \dots, m_o^-$ 应当表示此过程后留下的以及新产生的粒子), 似乎可以算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 $\langle$ 和 $\rangle$), 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, $\langle \phi | \psi \rangle = \int \phi^*(x) \psi(x) dx$, 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 ($\dots$ 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

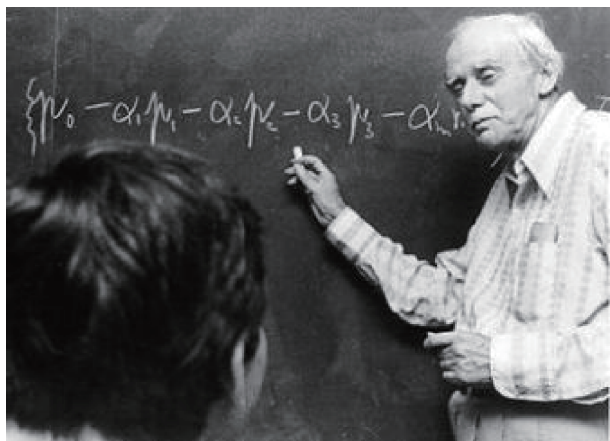


图6 晚年的狄拉克在讲解狄拉克方程。这张照片定义了什么是合格的老师

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

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 Ausbeute-funktion 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



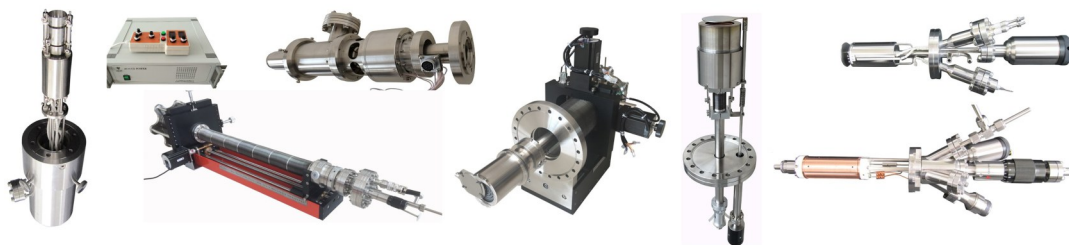
大连齐维科技发展有限公司

地址: 大连高新园区龙头工业园龙天路27号

电话: 0411-8628-6788 传真: 0411-8628-5677

E-mail: info@chi-vac.com HP: <http://www.chi-vac.com>

表面处理和薄膜生长产品: 氩离子枪、RHEED、磁控溅射靶、束源炉、电子轰击蒸发源、样品台。



超高真空腔室和薄膜生长设备: PLD系统、磁控溅射系统、分子束外延系统、热蒸发镀膜装置。

