

# “猜”出来的方程：薛定谔方程和狄拉克方程

董广宇

## （一）薛定谔方程

薛定谔方程是量子力学中描述微观粒子运动的基本方程；薛定谔方程之于量子力学，相当于牛顿运动定律之于经典力学。

我们知道，“万物由原子构成”，那么，原子是怎么运动的呢？还有，原子是否可以再分？如果可以再分，那原子内部是怎么运动的呢？薛定谔方程就可以描述这些运动。

让我们先来看看薛定谔方程长什么样：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\Psi}{\partial z^2}\right) + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

方程也可以用拉普拉斯算符表达，这样略显简洁：

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

方程中的关键就是波函数  $\Psi(x, y, z, t)$ 。

薛定谔方程从形式上看，有点像扩散方程，但薛定谔方程的实质是波动方程，很奇怪是吧。但更奇怪的是，这样一个复杂的方程竟然是薛定谔“猜”出来的！

正是因为薛定谔方程是薛定谔“猜”出来的，所以薛定谔自己也不清楚该波动方程中最重要的波函数  $\Psi$  的含义，于是，这就引发了当时全世界最顶尖的物理学家们都去寻找这个神秘的  $\Psi$  之谜。目前，被公认的、同时也被实验验证的波函数  $\Psi$  的含义，是由波恩提出的： $\Psi$  是概率振幅。什么意思呢？就是说，用波函数  $\Psi$  可以描述微观运动粒子在各处被发现的概率。

一切运动中的微观粒子都具有波粒二象性，所谓波粒二象性，简单来说就是：运动中的微观粒子会表现出波动性，其波长和动量的关系式符合德布罗意公式。我们把这种波称为物质波。物质波不是经典物理

学意义上的机械波或电磁波，物质波是概率波，即：物质波在某一地方的强度，与在该处找到物质波所代表的粒子的概率成正比。

薛定谔方程描述的就是这种物质波，现在你应该理解了，为什么说用方程中的波函数  $\Psi$  可以描述微观运动粒子在各处被发现的概率。

物理概念讲完了，现在我们就来看看，薛定谔大师当时是怎么“猜”出这个方程的。

根据狭义相对论：

$$\because m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\because E = mc^2$$

$$\because p = mv$$

$$\therefore E^2 = (pc)^2 + (m_0c^2)^2$$

根据光量子理论，对于光子：

$$\because m_0 = 0$$

$$\therefore E = pc$$

$$\because E = h\nu$$

$$\therefore E = h\nu = pc$$

$$\because c = \lambda\nu$$

$$\therefore \lambda = \frac{h}{p}$$

上述推导式中， $h$  为普朗克常数， $c$  为光速， $p$  为光子动量，最后一个式子表示：光子所表现出来的波动性，其波长与光子动量之间的关系。

根据这个波长的式子，德布罗意采用类比法，认为（其实当时是假设，以后不断被实验证实）：任何微观运动粒子都和光子一样，具有波粒二象性，和这些粒子相联系的波称为物质波，其波长符合上述公式。物质波的波长、频率、相速度，分别为：

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

$$v = \frac{E}{h} = \frac{mc^2}{h}$$

$$u = \lambda v = \frac{c^2}{v}$$

普朗克量子数的计算式 ( $E=hv$ ) 其实已经表明微观粒子的波粒二象性:  $E$  体现粒子性,  $v$  体现波动性。

德布罗意给出了物质波的概念, 现在轮到薛定谔出场了, 他需要给出一个描述物质波的方程。薛定谔这项工作的起点其实就是经典物理学里的波动方程:

$$\nabla^2 \Psi = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

式中的  $\Psi$  就是波函数,  $u$  是波的传播速度, 在物质波中,  $u$  为相速度。

为了使讨论简化, 只考虑一维的情形 ( $x$  方向传播的波), 故波动方程简化为:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

根据数学物理方程的解法, 存在一个解, 即, 可获得如下一个波函数的解析式:

$$\Psi = Ae^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} = Ae^{i(kx - \omega t)}$$

式中,  $A$  为波的振幅, 矢量  $k$  称为波矢, 表示波的传播方向, 此处的方向与矢量  $x$  相同,  $\omega$  是角频率, 二者大小为:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\omega = 2\pi\nu$$

有物理学知识基础的人估计会问, 从该波函数的形式来看, 其实就是经典物理意义上的单色平面波 (所谓单色平面波, 是指具有单一频率且在时间空间上无限延续的平面波), 那么, 为什么此处的波函数一定要用复数形式? 实数形式为什么不可以?

原因在于: 在量子力学里, 有测量意义的既不是波函数的实部, 也不是它的虚部, 而是波函数的绝对值的平方, 即概率密度。在薛定谔方程建立完成之前, 这样一个理由的说服力是很勉强的, 因为前面已经说过薛定谔自己也不清楚波函数  $\Psi$  的涵义, 事实上, 薛

定谔是假定了物质波在形式上对应经典物理意义上的平面波。还有, 单色平面波实际上是不存在的, 只是一个理想状态, 真实的波总是在有限的空间和时间之中。所以, 这就是为什么很多物理书上都说薛定谔方程的建立过程是“猜测”加“拼凑”。

有了波函数  $\Psi$  的表达式, 分别对  $x$  和  $t$  求偏导, 可以得到:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 \Psi = -\frac{4\pi}{\lambda^2} \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi = -i2\pi\nu \Psi$$

然后, 薛定谔对上述具有经典物理意义的两个式子引入了量子的性质, 这是关键的一个步骤:

$$\because \lambda = \frac{h}{p}$$

$$\because E = h\nu$$

$$\therefore \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{4\pi^2 p^2}{h^2} \Psi$$

$$\therefore \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i2\pi E}{h} \Psi$$

一个自由粒子的能量和动量之间的关系式为:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

如该粒子在一个势场  $V$  之中, 则粒子的能量关系式为:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

因此,  $p$  通过  $E$  表示如下:

$$p^2 = 2m(E - V)$$

将该式代入到前面算出来的波函数  $\Psi$  对  $x$ 、 $t$  的导函数式子, 得到:

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \Psi$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$\therefore -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = E\Psi$$

$$\therefore i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\Psi$$

最后两式右边相同, 于是得到一维的薛定谔方程:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

三维形式的薛定谔方程如下：

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

薛定谔方程的建立过程到此已经结束，需要指出，该方程是非相对论化的，即适用于速度不太大的粒子，后来是由物理学家狄拉克将方程相对论化，薛定谔方程转变为狄拉克方程。

## (二) 狄拉克方程

由薛定谔方程改变后的狄拉克方程可以适用于高速运动的微观粒子。

让我们先来看看狄拉克方程长什么样：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar c (\alpha_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z}) + (\alpha_4 m_0 c^2 + V)\Psi$$

比起薛定谔方程，是不是感觉复杂了不少，其实这还不算，方程中的四个  $\alpha$  不是常数，而是四个矩阵，每个  $\alpha$  都是一个  $4 \times 4$  的矩阵，因此，相应地，作为方程的解，波函数  $\Psi$  是一个  $4 \times 1$  的矩阵，换言之，狄拉克方程是一个方程组，有四个解。

面对这么复杂的一个方程，狄拉克是如何“猜”出来的呢？让我们依然从狭义相对论开始说起。

根据狭义相对论：

$$\because m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\because E = mc^2$$

$$\therefore E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = m_0 c^2 \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (0 \leq \frac{v^2}{c^2} < 1)$$

当  $-1 < x < 1$  时，可以将以下函数  $f(x)$  展开成麦克劳林级数（即关于  $x$  的幂级数）：

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x}} = 1 + \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2 + \frac{5}{16}x^3 + \dots$$

对比上下两式，将  $E$  的表达式写成麦克劳林级数形式：

$$E = m_0 c^2 \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = m_0 c^2 (1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} + \frac{3}{8} \frac{v^4}{c^4} + \dots)$$

从而可以得到能量展开式：

$$E = m_0 c^2 + \frac{1}{2} m_0 v^2 + \frac{3}{8} \frac{m_0 v^4}{c^2} + \dots$$

从以上这个式子，我们可以知道，在经典力学中，由于速度  $v$  非常之低， $v$  和光速  $c$  相比可以忽略不计，因此上式中从第三项开始就略去不计，但在经典力学的能量表达式中，通常也不包含式中的首项（该项也称为静止能量项），因此，能量  $E$  记为（ $p$  为动量）：

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m}$$

读者也许会问，那为什么在这种非相对论能量表达式中，不需要包含静止能量项呢？原因在于：静止能量这一项没有包含速度  $v$ ，而在经典力学里，我们只讨论质点的能量如何依据速度而变化的问题；当一个物系中发生的能量变化  $\Delta E$  大到足以使所引起的质量（严格来说是惯性质量）变化达到可以观察的程度时，才考虑在能量表达式中加入静止能量项，比如在核反应的情况下就是如此。

对于高速运动的自由微观粒子，相对论能量的近似表达式一般记为：

$$E = m_0 c^2 + \frac{1}{2} m_0 v^2 = m_0 c^2 + \frac{p^2}{2m_0}$$

这里也给出相对论能量的精确表达式：

$$E = c\sqrt{p^2 + (m_0 c)^2}$$

$$\because m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

$$\because E = mc^2$$

$$\because p = mv$$

$$\therefore E^2 = (pc)^2 + (m_0 c^2)^2$$

在近似表达式中，为什么一般情况下仅仅保留能量展开式中前两项？因为当速度  $v$  等于十分之一光速  $c$ 、甚至四分之一光速  $c$  时，从第三项开始，其与第二项的比值非常小，所以可以忽略不计。

假如该高速运动粒子又在一个势场  $V$  之中，则该粒子的近似能量关系式为：

$$E = \frac{p^2}{2m_0} + m_0 c^2 + V$$

因此， $p$  通过  $E$  表示如下：

$$p^2 = 2m_0(E - m_0 c^2 - V)$$

阅读仔细的读者看到这个式子，估计脑海中会闪过一个念头：根据前面一节中的内容，将上式代入到波函数  $\Psi$  对  $x$ 、 $t$  的导函数式中，如此就可以求得相对论化的一维和三维薛定谔方程了：

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + (m_0 c^2 + V)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi + (m_0 c^2 + V)\Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

这样的式子正确么？从建立的过程看，形式上没错，但没有考虑方程两边的偏导阶数平衡。原因在于：狭义相对论中，时间  $t$  和空间坐标  $(x, y, z)$  的地位是等同的， $t$ 、 $x$ 、 $y$ 、 $z$  共同构成了四维时空坐标，而在上面两式中，波函数  $\Psi$  对  $(x, y, z)$  是二阶偏导，但对  $t$  是一阶偏导，这就导致了对同等时空坐标  $(x, y, z, t)$  偏导的不平衡；因此，求解相对论化的薛定谔方程，波函数  $\Psi$  对  $(x, y, z, t)$  的偏导必须同阶，都是一阶、或都是二阶；但是波函数  $\Psi$  对  $t$  进行二阶及以上偏导时，会导致波函数  $\Psi$  的概率统计失去意义，比如克莱因-戈登方程就是把波函数  $\Psi$  对  $t$  作二阶偏导，使得最后的计算结果出现了负概率。

正是基于以上的考虑，狄拉克选择用波函数  $\Psi$  对四维时空坐标  $(x, y, z, t)$  统一作一阶偏导，以此作为其工作的起点。在正式讲述狄拉克是怎么“猜”方程之前，还需要一些知识准备：量子力学中的能量算符和动量算符。

我们先来回顾一下前面一节中提到的波函数  $\Psi$  的解析式：

$$\Psi = A e^{i(\vec{k} \cdot \vec{x} - \omega t)} = A e^{i(kx - \omega t)}$$

我们用波函数  $\Psi$  求出对  $t$ 、 $x$  的一阶偏导：

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\omega \Psi = -i2\pi \frac{E}{h} \Psi = -\frac{i}{\hbar} E \Psi$$

$$\frac{\partial \Psi}{\partial x} = k \Psi = i \frac{2\pi}{\lambda} \Psi = i \frac{h}{\lambda h} \Psi = \frac{i}{\hbar} p \Psi$$

整理以上两式，可得（此式中动量只有  $x$  方向）：

$$E \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{E} \Psi$$

$$\vec{p}_x \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x} = \hat{p}_x \Psi$$

由此引出能量算符和动量算符：

$$\hat{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$$

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\vec{\hat{p}} = \hat{p}_x + \hat{p}_y + \hat{p}_z = -i\hbar \left( \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \right) = -i\hbar \nabla$$

能量  $E$  与波函数  $\Psi$  相乘，等于能量算符作用于波函数  $\Psi$ ；同样，动量  $p$  与波函数  $\Psi$  相乘，等于动量算符作用于波函数  $\Psi$ 。不过这样的运算对应规则只适用于直角坐标系下，如要过渡到其他坐标系，可以先在直角坐标系中使用这些算符，然后再做坐标变换以过渡到其他坐标系。

举个例子简要介绍一下能量算符和动量算符怎么用（动量只考虑  $x$  方向）：

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{1}{2m} \vec{p}_x \cdot \vec{p}_x$$

上式两边同乘以波函数  $\Psi$ ，根据算符运算法则，将得到：

$$\therefore E \Psi = \frac{1}{2m} \vec{p}_x \cdot \vec{p}_x \Psi$$

$$\therefore E \Psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

$$\therefore \frac{1}{2m} \vec{p}_x \cdot \vec{p}_x \Psi = \frac{1}{2m} \vec{p}_x (\vec{p}_x \Psi)$$

$$\therefore \vec{p}_x \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}$$

$$\therefore \vec{p}_x (\vec{p}_x \Psi) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} (-i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial x}) = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

$$\therefore i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$$

上面得到的最后一式正是非相对论化的自由粒子的一维薛定谔方程。

谈了这么久，终于要谈到狄拉克了，因为假使没有之前的知识积累，将看不懂狄拉克方程的建立过程。

在没有外加势场  $V$  的情形下，高速自由粒子的能量精确表达式为：

$$E = c \sqrt{p^2 + (m_0 c)^2} = c \sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + (m_0 c)^2}$$

上式两边同乘以波函数  $\Psi$ ，得到：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = c\sqrt{-\hbar^2 \nabla^2 + (m_0 c)^2} \Psi$$

这种带有根号的二阶偏导方程，处理起来相当困难，这势必需要换一种思路。

狄拉克设想：如果让能量  $E$  和动量  $p$  的关系呈线性，那么使用能量算符和动量算符就可以使得波函数  $\Psi$  对四维时空  $(x, y, z, t)$  的一阶偏导达到统一，从而，能量动量关系与相对论的时空变换得以自洽，而这需要对能量动量关系进行因式分解。

这样一种设想作为“猜测”方程的起始引导显得极其重要，因为很有可能会决定了以后的工作是失败还是成功；接下去的几个“猜测”步骤也十分关键。正是这个开始的设想以及之后的几个步骤，将狄拉克的数学物理天赋体现得淋漓尽致。

狄拉克先将能量表达式中的矢量进行标量化处理：

$$E = c\sqrt{\vec{p} \cdot \vec{p} + (m_0 c)^2} = c\sqrt{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + (m_0 c)^2}$$

式中，根号下面是四个分量平方之和，狄拉克假定（以后的事实表明，他这样的假定是正确的）能量  $E$  和四个分量之间存在着最简单的一次线性关系，于是，可以拼凑出一个去掉根号的待定系数方程：

$$E = c(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_4 m_0 c)$$

前后式子对比一下，而后平方，我们可以得到：

$$p_x^2 + p_y^2 + p_z^2 + (m_0 c)^2 = (\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_4 m_0 c)^2$$

上式的右边展开以后，再和左边比较，可得：

$$\alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \alpha_4^2 = 1$$

$$\alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1 = 0$$

$$\alpha_1 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_1 = 0$$

$$\alpha_1 \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_1 = 0$$

$$\alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2 = 0$$

$$\alpha_2 \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_2 = 0$$

$$\alpha_3 \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_3 = 0$$

这个方程组在实数范围内、复数范围内都没有解！从后面六个方程形式来看，可以发现，任意两个  $\alpha$  之间的乘积位置不具备互换性，而是具有方向性，因此狄拉克想到了用矩阵来解决问题。以后我们将上述的七个方程称为狄拉克矩阵。

狄拉克首先想到的就是当时已经存在的泡利矩阵（一组  $2 \times 2$  的矩阵，关于泡利矩阵是怎么来的，这是另外一个话题），因为泡利矩阵的运算结果和狄拉克矩阵非常相似，我们先来看泡利矩阵的具体内容：

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

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

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

$$\sigma_1^2 = \sigma_2^2 = \sigma_3^2 = 1$$

$$\sigma_1 \sigma_2 + \sigma_2 \sigma_1 = 0$$

$$\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_1 = 0$$

$$\sigma_2 \sigma_3 + \sigma_3 \sigma_2 = 0$$

与狄拉克矩阵很相似是不是？有了这么好的基础，接下来的工作就容易多了——一组  $2 \times 2$  的矩阵描述了三个泡利矩阵，而狄拉克矩阵有四个；再通过观察泡利矩阵中各元素的分布规律和取值特点，而后分析出狄拉克矩阵的特征值、矩阵对角线元素的正负对称性、矩阵阶数的奇偶性；于是，狄拉克猜测自己所要的矩阵应该为  $4 \times 4$  矩阵。基于泡利矩阵，经过组合与拼凑，狄拉克给出了一组解：

$$\alpha_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\alpha_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \alpha_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

狄拉克矩阵的这组解被称为“泡利组”，需要说明的是，这不是狄拉克矩阵的唯一解，比如，物理学家费米也给出了一组解，一般把这组解称为“标准组”：

$$\gamma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$\gamma_3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

至此，我们已经把狄拉克矩阵的解求出，这意味着相对论化的能量动量线性关系式也就确定了，该关系式中的四个待定系数是四个  $4 \times 4$  的矩阵，这四个矩阵构成一个矩阵组，并且这四个矩阵相互之间满足狄拉克矩阵的运算结果，以上描述用数学式子表示：

$$(1) E = c(\alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_4 m_0 c)$$

$$(2) \vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4)$$

$$(3) \begin{cases} \alpha_1^2 = \alpha_2^2 = \alpha_3^2 = \alpha_4^2 = 1 \\ \alpha_1 \alpha_2 + \alpha_2 \alpha_1 = 0 \\ \alpha_1 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_1 = 0 \\ \alpha_1 \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_1 = 0 \\ \alpha_2 \alpha_3 + \alpha_3 \alpha_2 = 0 \\ \alpha_2 \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_2 = 0 \\ \alpha_3 \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_3 = 0 \end{cases}$$

现在把上面的能量动量线性关系式两边同乘以波函数  $\Psi$ ，再根据能量算符和动量算符，我们就可以得到自由粒子的狄拉克方程，注意方程中的偏导阶数，波函数  $\Psi$  对四维坐标  $(x, y, z, t)$  统一做了一阶偏导：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar c (\alpha_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z}) + \alpha_4 m_0 c^2 \Psi$$

当然这个式子还可以作简化，我们设定：

$$\vec{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$$

$$\vec{\alpha} \cdot \vec{p} = \alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z = -i\hbar (\alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z})$$

那么之前的自由粒子的狄拉克方程可以简写成：

$$\hat{E} \Psi = (c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \alpha_4 m_0 c^2) \Psi$$

假若粒子还处于一个势场  $V$  之中，则此时的狄拉克方程为：

$$\hat{E} \Psi = (c \vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \alpha_4 m_0 c^2 + V) \Psi$$

当然也可以写成具有直观物理意义的狄拉克方程，也就是文章一开始就写出的那个巨复杂的方程：

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -i\hbar c (\alpha_1 \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \alpha_2 \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \alpha_3 \frac{\partial \Psi}{\partial z}) + (\alpha_4 m_0 c^2 + V) \Psi$$

由于狄拉克方程中的系数是  $4 \times 4$  矩阵，所以方程的解，波函数  $\Psi$  就是一个  $4 \times 1$  矩阵，即，狄拉克方程的解是四个波函数  $\Psi$ ：

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \\ \Psi_3 \\ \Psi_4 \end{pmatrix}$$

这不像薛定谔方程那样只有一个解，也正是因为这 4 个波函数  $\Psi$ ，狄拉克最后求解出电子具有负能态，从而预言存在电子的反粒子——正电子（也由此引发了“狄拉克之海”一说），之后被实验确认，从此让世人知道了反物质。

