教学研究

海森伯矩阵力学

黄永义，邵国运，张淳民
(西安交通大学 理学院，陕西 西安 710049)

摘要：重述了矩阵力学的理论框架，包括位置动量不对易关系，算符的海森伯运动方程，非简并微扰论，给出了一维谐振子的矩阵力学求解过程.

关键词：量子力学；海森伯绘景；能量表象
中图分类号：O 413.1　　文献标识码：A　　文章编号：1000-0712(2020)02-0005-05
【DOI】10.16854/j.cnki.1000-0712.190178

矩阵力学和波动力学是量子力学的 3 种有效形式中最早的两种，第三种形式是费思曼路径积分，矩阵力学是海森伯于 1925 年 7 月首先提出，并由海森伯、玻恩和 Jordan 共同完成的.矩阵力学的提出，在当年无疑是一个飞跃，但不久就被波动力学所超越.在薛定谔波动力学建立之前，矩阵力学并没有立即认为是一个关键的突破，因为矩阵力学被处理问题的困难所困扰，如散射问题，矩阵力学几乎困难到无法处理.人们，包括理论创建者们，都认为矩阵力学只是通向终极正确理论的第一步.处理具体问题时，波动力学相比矩阵力学游刃有余，处理过程要简单得多，这也是薛定谔波动力学被人们热情接受的主要原因[1].波动力学和矩阵力学等价性被证明后[2]，1925 至 1927 年玻尔、海森伯等人兼顾到物质的波粒二象性，提出了量子力学的哥本哈根解释[3].事实上国内大多数量子力学教材几乎不怎么讲矩阵力学，只是在薛定谔绘景中在特定表象下，如 Q 表象，将波函数，薛定谔方程，本征值方程，力学量平均值和表象变换式等内容写成矩阵形式，这样的做法本质上还是特定表象下的波动力学.由于教材讲得很少或者几乎不讲，因此大多数学生不清楚矩阵力学是怎么一回事.事实上，海森伯矩阵力学本质上是海森伯绘景下能量表象的量子力学，其力学量的算符随时间变化，“量子态”不随时间变化(海森伯那时没有量子态的概念).海森伯的天才在于他直接找到了坐标的矩阵形式，借助于玻尔-索末菲量子化条件和玻尔对应原理得到了满足 Kramers 色散公式或 Kuhn-Thomas 求和公式的坐标矩阵的量子化条件，由此可得到谐振子对角化的能量矩阵(能量表象下哈密顿量当然是对角化的)和随时间变化的坐标矩阵.本文简要地重述了矩阵力学的理论框架，包括位置动量不对易关系，算符的海森伯运动方程，非简并微扰论，还给出了一维谐振子的矩阵力学求解过程，本文的目的是让读者对海森伯矩阵力学有一个概要的认识.

1 矩阵力学理论框架

1924 年为了用波动理论解释康普顿散射，玻尔，Kramers 和 Slater 提出了虚辐射场概念，假定处于定态的一个原子被多种频率的吸收光和发射光的虚场所包围，这种虚场将决定该原子本身到其他原子的量子跃迁的概率.他们还认为能量守恒定律和动量守恒定律只在统计意义下才能成立.然而 Bothe、康普顿等人实验上证实能量、动量守恒定律在电子和光子相互作用时也成立.守恒定律只在统计意义下成立的观点虽然被否定，但虚振子模型在 Kramers 色散理论中被保留下来.受玻尔对应原理的启发，Kramers 在 Ladenburg 的研究结果基础上提出

收稿日期：2019-04-23；修回日期：2019-09-02
基金项目：西安交通大学“名师、名课、名教材”建设工程项目；西安交通大学第二批“课程思政”示范课程项目；西安交通大学研究生教育改革项目；西安交通大学研究生教学研究与教学改革专项；西安交通大学基本科研业务费项目；国家自然科学基金重点项目(41530422)；国家高技术研究发展计划(2012121101)资助
作者简介：黄永义(1978—)，男，安徽阜阳人，西安交通大学理学院副教授，主要从事原子物理的教学和研究工作.
通信作者：张淳民，E-mail：zcm@xjtu.edu.cn

了新的色散公式，Kramers 的色散公式包含了虚振子吸收和发射作用.1924 年 12 月海森伯和 Kramers 一起用玻恩的方法研究色散问题，借助于对应原理他们给出了色散理论的完全量子化的 Kramers-海森伯(KH) 公式，他们的色散公式只包含与原子两个定态相关的跃迁量.玻恩发现这个跃迁量对应于经典理论中振幅的平方，玻恩和海森伯，Jordan 讨论中认识到跃迁量很可能是起核心作用的量，要用某种符号乘法来处理.1925 年夏天海森伯正是从玻尔频率条件和 Kramers 的色散理论看到了端倪，终于揭开了跃迁量中振幅的符号乘法之谜.他在理论中强调了可观察的物理量，很快创立了矩阵力学[4,5].

经典物理使用振幅和频率描述简谐振动时，必须把坐标写成傅里叶级数:

$$x(t)=\sum_{\tau} x_{\tau}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\tau\omega(n)t} \tag{1}$$

$x(t)$ 是实数，使得式子 $x_{-\tau}=x_{\tau}^{*}$ 成立. 量子论中代替式(1) 表述原子的信息，海森伯用频率和振幅的新形式:

$$x(n,l)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(n,l)t} \tag{2}$$

来代替式(1)，式(2) 中 $l=n-\tau$ 与式(1) 中的各项对应，并且假定 $x(l,n)=x(n,l)^{*}$ 和 $\omega(l,n)=-\omega(n,l)$ 成立，下面的分析会看到 $x(n,l)$ 就是一个无限维方矩阵.

现在就可以考查一下玻尔-索末菲量子化条件:

$$\oint p\mathrm{d}q=J,\quad J=nh \tag{3}$$

具有的新形式了.式中 q 是坐标，p 是动量，J 为作用量，n 为整数，h 为普朗克常数.为此我们还是从经典表达式(1) 出发，借助对应原理将量子化条件转译至量子论的表述. 由(1) 式得

$$m\dot{x}=m\sum_{\tau} x_{\tau}\mathrm{i}\tau\omega(n)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\tau\omega(n)t}$$

量子论条件表述为

$$\oint m\dot{x}\mathrm{d}x=\oint m\dot{x}^{2}\mathrm{d}t=2\pi m\sum_{-\infty}^{\infty}{}_{\tau}\,x_{\tau}x_{-\tau}\tau^{2}\omega(n)=$$
$$2\pi m\sum_{-\infty}^{\infty}{}_{\tau}\,|x_{\tau}|^{2}\tau^{2}\omega(n) \tag{4}$$

得出上式时使用了 $\delta(\omega)=\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_{0}^{T}\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\omega}\mathrm{d}t$. 对应原理的要求，量子化条件(3) 不能和量子动力学一致，用下面的表达式更自然一些，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}n}(nh)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}n}\oint p\mathrm{d}q=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}n}\oint m\dot{x}^{2}\mathrm{d}t$$

考虑到(4) 式，上式为

$$h=2\pi m\sum_{-\infty}^{\infty}{}_{\tau}\,\tau\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}n}\left(\tau\omega(n)\,|x_{\tau}|^{2}\right) \tag{5}$$

现在需要将(5) 式通过对应原理转译至量子论中.经典频率向量子频率过渡按下式

$$\tau\omega=\tau\frac{1}{h}\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}n}\rightarrow\omega(n,n-\tau)$$

按对应原理的要求，当主量子数 n 很大时光谱的量子频率过渡到经典的频率. 参照玻尔的频率条件，

$$\tau\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}n}\rightarrow E(n)-E(n-\tau)$$
$$\Rightarrow\tau\frac{\mathrm{d}f(n)}{\mathrm{d}n}\rightarrow f(n)-f(n-\tau)$$

上式中 $f(n)$ 为任意函数，即玻尔对应原理要求将经典情况函数 f 对量子数 n 微商替换为量子论情况下差分的形式. 海森伯从玻恩那学到了将式(5) 转译为满足 Kramers 的色散公式或 Kuhn-Thomas 求和公式的差分形式:

$$h=2\pi m\sum_{-\infty}^{\infty}{}_{\tau}\left[|x(n+\tau,n)|^{2}\omega(n+\tau,n)-\right.$$
$$\left.|x(n,n-\tau)|^{2}\omega(n,n-\tau)\right] \tag{6}$$

式(6) 也可写为

$$\hbar=m\sum_{-\infty}^{\infty}{}_{\tau}\left[|x(n+\tau,n)|^{2}\omega(n+\tau,n)-\right.$$
$$\left.|x(n,n-\tau)|^{2}\omega(n,n-\tau)\right]=$$
$$-2m\sum_{-\infty}^{\infty}{}_{\tau}\,|x(n,n-\tau)|^{2}\omega(n,n-\tau) \tag{7}$$

式(6) 为海森伯量子化条件.由(7) 式和谐振子经典振动方程，可以求得谐振子的对角化的哈密顿量和坐标矩阵[6]:

$$E=\hbar\omega_{0}\begin{pmatrix}1/2&0&0&\cdots\\0&3/2&0&\cdots\\0&0&5/2&\cdots\\\cdots&\cdots&\cdots&\cdots\end{pmatrix},$$

$$x=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_{0}}}\begin{pmatrix}0&\sqrt{1}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{0}t}&0&0&\cdots\\\sqrt{1}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{0}t}&0&\sqrt{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{0}t}&0&\cdots\\0&\sqrt{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{0}t}&0&\sqrt{3}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{0}t}&\cdots\\\cdots&\cdots&\sqrt{3}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_{0}t}&\cdots&\cdots\end{pmatrix}$$

海森伯量子化条件式(6) 是对应原理的必然结果，事实上原子被单色平面光 $E=E_{0}\cos(2\pi\nu t)$ 辐照后产生的极化强度由 KH 色散公式给出，

$$P=\frac{e^{2}E_{0}\cos(2\pi\nu t)}{h}\sum_{\tau=-\infty}^{\infty}\left[\frac{|x(n,n+\tau)|^{2}\nu(n,n+\tau)}{\nu^{2}(n,n+\tau)-\nu^{2}}-\right.$$
$$\left.\frac{|x(n,n-\tau)|^{2}\nu(n,n-\tau)}{\nu^{2}(n,n-\tau)-\nu^{2}}\right]$$

在入射光频率远大于原子跃迁频率的高频极限下即 $\nu>>\nu(n,n\pm\tau)$，KH 色散公式变为

$$P=-\frac{e^2E_0\cos(2\pi\nu t)}{h\nu^2}\sum_{\tau=-\infty}^{\infty}[|x(n,n+\tau)|^2\nu(n,n+\tau)-|x(n,n-\tau)|^2\nu(n,n-\tau)]$$

依据对应原理，高频极限下 KH 公式必然过渡到经典结果 $P'=-\frac{e^2E_0\cos(2\pi\nu t)}{4\pi^2m\nu^2}$，比较 P 和 P' 表达式，就得到了海森伯量子化条件式(6)。

海森伯发表了他的新力学后，玻恩和 Jordan 进一步发展了海森伯的思想，他们做出的最重要的工作是将海森伯量子化条件(7)改写为一个更简洁的形式[7]。玻尔-索末菲量子化条件(3)可写为

$$J=\oint p\mathrm{d}q=\int_0^{2\pi/\omega}p\dot{q}\mathrm{d}t \tag{8}$$

经典动量，位置的表达式为

$$p=\sum_\tau p_\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\tau\omega t},\ q=\sum_\tau q_\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\tau\omega t}$$

显然

$$\dot{q}=\sum_\tau \mathrm{i}\omega\tau q_\tau \mathrm{e}^{\mathrm{i}\tau\omega t}$$

将这些表达式代入量子化条件的式(8)并在方程的两边对 J 偏微分得

$$1=2\pi\mathrm{i}\sum_{-\infty}^{\infty}\tau\frac{\partial}{\partial J}(q_\tau p_{-\tau})=2\pi\mathrm{i}\sum_{-\infty}^{\infty}\tau\frac{\partial}{\partial J}(q_\tau p^*_\tau) \tag{9}$$

得到上式时用到了关系式 $\delta(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_0^T\mathrm{e}^{\mathrm{i}t\omega}\mathrm{d}t$，注意到 $J=nh$，由对应原理可知，式(9)转译至量子论后具有如下的形式：

$$1=\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\sum_{\tau=-\infty}^{\infty}[p^*(n+\tau,n)q(n+\tau,n)-q(n,n-\tau)p^*(n,n-\tau)]=\frac{2\pi\mathrm{i}}{h}\sum_{\tau=-\infty}^{\infty}[p(n,n+\tau)q(n+\tau,n)-q(n,n-\tau)p(n-\tau,n)] \tag{10}$$

物理量 q、p 在量子论中显然是矩阵形式，式(10)可以写成简洁的形式如下：

$$pq-qp=-\mathrm{i}\hbar \tag{11}$$

式中 $\hbar=h/(2\pi)$ 为约化普朗克常数，式(11)是量子力学中最基本的位置动量对易关系。

由基本对易关系和力学中的正则方程，海森伯、玻恩、Jordan 的 3 人文章得到了算符的海森伯运动方程，还给出了能量表象下的微扰论[8]。设 f 为 q、p 的所有有理函数，由基本对易关系(11)式得到

$$\frac{\hbar}{i}\frac{\partial f}{\partial p}=fq-qf,\ \frac{\hbar}{i}\frac{\partial f}{\partial q}=pf-fp \tag{12}$$

令 f 等于系统的哈密顿量 H，哈密顿正则方程 $\dot{p}=-\frac{\partial H}{\partial q}$，$\dot{q}=\frac{\partial H}{\partial p}$，则(12)变为

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\dot{q}=Hq-qH,\ \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\dot{p}=Hp-pH \tag{13}$$

这样所有是 q、p 的有理函数 $O(p,q)$ 的运动方程为

$$i\hbar\dot{O}=OH-HO=[O,H] \tag{14}$$

式(14)即算符的海森伯运动方程。

上述 3 人的文章将正则变换引进量子力学，即保持对易关系式(11)不变的变换为正则变换：

$$\bar{p}=SpS^{-1},\quad \bar{q}=SqS^{-1}$$

事实上，

$$\overline{qp}-\overline{pq}=i\hbar\Rightarrow SqS^{-1}SpS^{-1}-SpS^{-1}SqS^{-1}=SqpS^{-1}-SpqS^{-1}=i\hbar SS^{-1}=\mathrm{i}\hbar \tag{15}$$

相应的正则变换矩阵满足 $SS^{-1}=S^{-1}S=I$，I 为单位矩阵，即 S 为幺正矩阵，$S^{-1}=S^+$。于是求解一个量子力学问题就是通过正则变换将系统哈密顿量对角化，

$$SHS^{-1}=E,\quad SH=ES \tag{16}$$

式中 E 为对角化的哈密顿量。对非简并微扰式(16)可形式写为

$$H=H^0+\lambda H^{(1)}+\lambda^2H^{(2)}+\cdots,$$
$$S=S^0+\lambda S^{(1)}+\lambda^2S^{(2)}+\cdots,$$
$$E=H^0+\lambda E^{(1)}+\lambda^2E^{(2)}+\cdots \tag{17}$$

式中 H^0，$E^{(1)}$，$E^{(2)}$ 均为对角化的哈密顿量，式(17)代入式(16)可得

$$\lambda^0:S^0H^0=H^0S^0 \tag{18}$$

$$\lambda^1:S^0H^{(1)}+S^{(1)}H^0=H^0S^{(1)}+E^{(1)}S^0 \tag{19}$$

$$\lambda^2:S^0H^{(2)}+S^{(1)}H^{(1)}+S^{(2)}H^0=H^0S^{(2)}+E^{(1)}S^{(1)}+E^{(2)}S^0 \tag{20}$$

由式(18)得，

$$\sum_i(S^0_{mi}H^0_{in}-H^0_{mi}S^0_{in})=S^0_{mn}(H^0_{nn}-H^0_{mm})=0 \tag{21}$$

因为 $H^0_{nn}-H^0_{mm}\neq0$，得 $S^0_{mn}=0$，即 S^0 为对角阵。再由幺正条件 $S^\dagger S=I$ 得

$$S^{0+}S^0+\lambda(S^{0+}S^{(1)}+S^{(1)+}S^0)+\cdots=I \tag{22}$$

零级近似下有 $S^{0+}S^0=I$，可取 $S^0=I$。而一级近似下 $S^{0+}S^{(1)}+S^{(1)+}S^0=0$，即 $S^{(1)}+S^{(1)+}=0$，可得 $S^{(1)}$ 对角元为零，$S^{(1)}_{mm}=0$。由式(19)得

$$H^{(1)}_{mn}+S^{(1)}_{mn}(H^0_{nn}-H^0_{mm})=E^{(1)}_{mn}\delta_{mn} \tag{23}$$

由式(23)得

$$E^{(1)}_{mm}=H^{(1)}_{mm}(m=n) \tag{24}$$

$$S_{mn}^{(1)}=\frac{H_{mn}^{(1)}}{H_{mm}^{0}-H_{nn}^{0}}\ (m\neq n) \tag{25}$$

由(20)式可得

$$H_{mn}^{(2)}+\sum_{i}S_{mi}^{(1)}H_{in}^{(1)}+S_{mn}^{(2)}(H_{nn}^{0}-H_{mm}^{0})-S_{mn}^{(1)}E_{mm}^{(1)}=E_{mn}^{(2)}\delta_{mn} \tag{26}$$

由(26)式得

$$E_{mm}^{(2)}=H_{mm}^{(2)}+\sum_{i(\neq m)}{}'\frac{H_{mi}^{(1)}H_{im}^{(1)}}{H_{mm}^{0}-H_{ii}^{0}}=H_{mm}^{(2)}+\sum_{i(\neq m)}{}'\frac{|H_{mi}^{(1)}|^{2}}{H_{mm}^{0}-H_{ii}^{0}} \tag{27}$$

$$S_{mn}^{(2)}=-\frac{(H_{mm}^{(1)}-H_{nn}^{(1)})H_{mn}^{(1)}}{(H_{mm}^{0}-H_{nn}^{0})^{2}}+\frac{H_{mn}^{(2)}}{H_{mm}^{0}-H_{nn}^{0}}+\sum_{i(\neq n)}{}'\frac{H_{mi}^{(1)}H_{in}^{(1)}}{(H_{mm}^{0}-H_{nn}^{0})(H_{mm}^{0}-H_{ii}^{0})} \tag{28}$$

从以上表达式的结果看(角标代表能级),矩阵力学的正则变换在能量表象进行的,其非简并微扰结果和波动力学的结果完全一样.

2 一维谐振子的矩阵力学求解

海森伯矩阵力学的任务是在能量表象下将力学量对角化,获得力学量的本征值.三人文章得到角动量 L_z 的本征值 $m\hbar$,角动量模方 L^2 的本征值 $j(j+1)\hbar$,j 可取整数和半整数(某种意义上说矩阵力学预言了自旋).由 L^2 的结果,Pauli 借助于 Runge-Lenz 矢量得到了氢原子能量的 L^2 表达式,由此解出了氢原子的能级公式,具体论述参阅[5].这里给出最简单的一维谐振子的量子化,以此展示矩阵力学的求解过程.

一维谐振子的力学变量只有一个坐标 q 和其共轭动量 p,其哈密顿量为

$$H=\frac{1}{2m}(p^{2}+m^{2}\omega^{2}q^{2}) \tag{29}$$

式中 m 为振动粒子的质量,ω 为圆频率.海森伯运动方程为

$$\left.\begin{aligned}\dot{q}&=[q,H]/\mathrm{i}\hbar=\frac{p}{m}\\ \dot{p}&=[p,H]/\mathrm{i}\hbar=-m\omega^{2}q\end{aligned}\right\} \tag{30}$$

为方便,引进无量纲的复数力学变量:

$$a=\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(q+\frac{i}{m\omega}p\right) \tag{31}$$

将式(31)代入方程(30)得 $\dot{a}=-\mathrm{i}\omega a$,这个方程积分后给出

$$a=a_{0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{32}$$

上述结果和经典理论一样.将式(32)代入式(31)得

$$a_{0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}=\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(q+\frac{\mathrm{i}}{m\omega}p\right),$$

$$a_{0}^{+}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}=\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(q-\frac{\mathrm{i}}{m\omega}p\right) \tag{33}$$

式(33)中 q、p 为海森伯绘景中的位置算符和动量算符,它们随时间变化.令时间 $t=0$,式(33)可化为

$$a_{0}=\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(q_{0}+\frac{\mathrm{i}}{m\omega}p_{0}\right),$$

$$a_{0}^{+}=\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(q_{0}-\frac{\mathrm{i}}{m\omega}p_{0}\right) \tag{34}$$

式(34)中 q_0、p_0 为薛定谔绘景的下的位置算符和动量算符,它们不随时间变化.

由式(33)得到

$$\hbar\omega a_{0}^{+}a_{0}=H-\hbar\omega/2 \tag{35}$$

同理得

$$\hbar\omega a_{0}a_{0}^{+}=H+\hbar\omega/2 \tag{36}$$

由式(35)和式(36)得

$$a_{0}a_{0}^{+}-a_{0}^{+}a_{0}=1 \tag{37}$$

由式(35)得 $\hbar\omega a_0a_0^+a_0=a_0H-\hbar\omega a_0/2$,由式(36)得 $\hbar\omega a_0a_0^+a_0=Ha_0+\hbar\omega a_0/2$,两式相减

$$a_{0}H-Ha_{0}=\hbar\omega a_{0} \tag{38}$$

由(37)式得,对任意正整数 n,有

$$a_{0}(a_{0}^{+})^{n}-(a_{0}^{+})^{n}a_{0}=n(a_{0}^{+})^{n-1} \tag{39}$$

令 H' 为 H 一个本征值,而 $|H'\rangle$ 为本征右矢,由式(35)得

$$\hbar\omega\langle H'|a_{0}^{+}a_{0}|H'\rangle=\langle H'|H-\hbar\omega/2|H'\rangle=(H'-\hbar\omega/2)\langle H'|H'\rangle$$

由于 $\langle H'|a_0^+a_0|H'\rangle$ 为 $a_0|H'\rangle$ 长度的平方,因而 $\langle H'|a^+{}_0a_0|H'\rangle\geqslant 0$,同时 $\langle H'|H'\rangle\geqslant 0$,得

$$H'\geqslant\hbar\omega/2 \tag{40}$$

由式(38)得

$$Ha_{0}|H'\rangle=a_{0}H|H'\rangle-\hbar\omega a_{0}|H'\rangle=(H'-\hbar\omega)a_{0}|H'\rangle \tag{41}$$

$a_0|H'\rangle$ 也是 H 的本征右矢,属于本征值 $H'-\hbar\omega$,结合式(40)可以推出 H',$H'-\hbar\omega$,$H'-2\hbar\omega\cdots$ 都是本征值,但最小值只能是 $\hbar\omega/2$.事实上,从下面式子也能看出来,$Ha_0a_0|H'\rangle=(a_0H-\hbar\omega a_0)a_0|H'\rangle=(H'-2\hbar\omega)a_0a_0|H'\rangle$.

再由式(38)复共轭得

$$Ha_{0}^{+}|H'\rangle=a_{0}^{+}H|H'\rangle+\hbar\omega a_{0}^{+}|H'\rangle=(H'+\hbar\omega)a_{0}^{+}|H'\rangle$$

此式表明 $H'+\hbar\omega$,$H'+2\hbar\omega\cdots$ 也是 H 的本征值,$a_0^+|H'\rangle$,$(a_0^+)^2|H'\rangle\cdots$ 是本征矢,事实上从此式

$$Ha_{0}^{+}a_{0}^{+}|H'\rangle=(a_{0}^{+}H+\hbar\omega a_{0}^{+})a_{0}^{+}|H'\rangle=(H'+2\hbar\omega)a_{0}^{+}a_{0}^{+}|H'\rangle$$

也能看出.但排除掉 $a_0^+|H'\rangle=0$,因为若 $a_0^+|H'\rangle=$

0，则

$$0=\hbar\omega\langle H'|a_0a_0^+|H'\rangle=(H'+\hbar\omega/2)\langle H'|H'\rangle$$

得 $H'=-\hbar\omega/2$，该式和式(40)矛盾. 于是谐振子能量的本征值为

$$\hbar\omega/2,\quad 3\hbar\omega/2,\quad 5\hbar\omega/2,\quad 7\hbar\omega/2,\cdots \tag{42}$$

设 $|0\rangle$ 为最小的本征值 $\hbar\omega/2$ 的本征右矢，则有

$$a_0|0\rangle=0 \tag{43}$$

激发态的本征右矢为

$$|0\rangle,\quad a_0^+|0\rangle,\quad (a_0^+)^2|0\rangle,\quad (a_0^+)^3|0\rangle,\cdots \tag{44}$$

能量为 $(n+1/2)\hbar\omega$ 的定态对应于 $(a_0^+)^n|0\rangle$ 的态，这个态就称为第 n 级量子态. 由式(39)得到 $\langle 0|a_0^n(a_0^+)^n|0\rangle=n!$，得归一化的本征函数为

$$|0\rangle,\quad \frac{a_0^+|0\rangle}{\sqrt{1}},\quad \frac{(a_0^+)^2|0\rangle}{\sqrt{2!}},\quad \frac{(a_0^+)^3|0\rangle}{\sqrt{3!}},\cdots,$$

即

$$\frac{(a_0^+)^n|0\rangle}{\sqrt{n!}}=|n\rangle,H|n\rangle=(n+1/2)\hbar\omega|n\rangle.$$

由 $\frac{(a_0^+)^n|0\rangle}{\sqrt{n!}}=|n\rangle$ 和式(39)，得到 $a_0^+|n\rangle=\sqrt{n+1}|n+1\rangle$ 和 $a_0|n\rangle=\sqrt{n}|n-1\rangle$，进而 $\langle n|a_0|n+1\rangle=\sqrt{n+1}(n\geqslant 0)$，$\langle m|a_0^+|m-1\rangle=\sqrt{m}(m\geqslant 1)$. 由式(32)得

$$a=\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1}\,e^{-i\omega t} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\,e^{-i\omega t} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}\,e^{-i\omega t} & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{pmatrix}$$

$$a^+=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1}\,e^{i\omega t} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2}\,e^{i\omega t} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\,e^{i\omega t} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{pmatrix} \tag{45}$$

由式(31)得

$$q=\sqrt{\hbar/(2m\omega)}(a+a^+),p=i\sqrt{\hbar m\omega/2}(a^+-a),$$

结合式(45)得

$$q=\sqrt{\hbar/(2m\omega)}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1}\,e^{-i\omega t} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1}\,e^{i\omega t} & 0 & \sqrt{2}\,e^{-i\omega t} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2}\,e^{i\omega t} & 0 & \sqrt{3}\,e^{-i\omega t} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\,e^{i\omega t} & 0 & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{pmatrix}, \tag{46}$$

$$p=i\sqrt{\hbar m\omega/2}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1}\,e^{-i\omega t} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1}\,e^{i\omega t} & 0 & -\sqrt{2}\,e^{-i\omega t} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2}\,e^{i\omega t} & 0 & -\sqrt{3}\,e^{-i\omega t} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3}\,e^{i\omega t} & 0 & \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \end{pmatrix}. \tag{47}$$

从式(32)看力学量算符随时间改变，而量子态 $(a_0^+)^n|0\rangle/\sqrt{n!}=|n\rangle$ 不随时间变化，我们的运算在能量表象下海森伯绘景中进行的.

3 小结

本文重述了矩阵力学的理论框架，包括位置动量不对易关系，算符的海森伯运动方程，非简并微扰论，还给出了一维谐振子的矩阵力学求解过程. 这些内容向读者清晰地展示了海森伯矩阵力学本质上是海森伯绘景下能量表象的量子力学，其力学量的矩阵随时间变化，"量子态"不随时间变化. 事实上，矩阵力学能处理谐振子和非简谐振子，特别适合计算角动量的量子化. 没有额外的假设矩阵力学还能导出选择定则，也能计算正常 Zeeman 效应和 Stark 效应的谱线强度，还能处理原子对辐射的色散，一定程度上也能处理氢原子. 由于它的求解不涉及时间，因此对系统随时间演化的问题，如散射，矩阵力学就会遇到难以克服的困难. 海森伯矩阵力学虽然很繁琐，其成功也是有理由的. 量子力学有个演化方程(海森伯绘景下算符的海森伯运动方程或薛定谔绘景下量子态的薛定谔方程)，但要解决问题总得选定一个表象，海森伯选的是具体而方便的能量表象，薛定谔选的是抽象而简单的坐标表象，两种绘景下两种表象的结果完全一致. 量子力学中的力学量用算符表示，力学量算符在具体表象下都化为矩阵，矩阵力学和波动力学的区别在于: 在同样的表象下，矩阵力学是在海森伯绘景中运算，波动力学是在薛定谔绘景中运算，两者计算的随时间变化的力学量矩阵是完全一致的. 因此读者搞清楚矩阵力学的本质，实际上也加深了对量子力学的理解.

参考文献:

[1] Beller M. Matrix theory before Schrodinger: philosophy, problems, consequences [J]. Isis, 1983, 74(4): 469-491.

[2] Casado CD. A Brief history of the mathematical equivalence between the two quantum mechanics [J]. Lat Am J Phys Educ, 2008, 2(2): 152-155.

(下转 17 页)

参考文献:

[1] 陈元植.静电平衡原理与空腔导体内外两侧场强的独立性 [J]. 大学物理,1987, 1(4):11-11.

[2] 王秀庭.导体对磁场的屏蔽作用分析 [J].大学物理, 2012, 31(1):20-20.

[3] 韩鹏,郭雪鹏.金属球在电场中一定能达到静电平衡吗 [J].物理通报,2017. 36(9):111-111.

[4] 阎守胜.固体物理基础 [M].北京: 北京大学出版社,2011.

[5] 赵凯华,陈熙谋.电磁学(上册) [M].北京: 高等教育出版社,1985.

[6] Wei-Tian Deng, Xu-Guang Huang. Event-by-event generation of electromagnetic fields in heavy-ion collisions. Physical Review C,2012,85: 044907.

Discussion on the upper limit of electrostatic shielding

CEN Xian-zhuo[1,2], DENG Wei-tian[1]

(1. School of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan, Hubei 430074, China;
2. Dongguan Dalingshan Middle School, Dongguan, Guangdong 523820, China)

Abstract: The conductor shell in external electric field will produce inductive charge on its outer surface, and reach the electrostatic balance. The electric field in its cavity is zero everywhere, this is so called electrostatic shielding. However, if the external electric field is extremely strong, or the number of free electrons in the conductor is too small, so that the inductive field cannot offset the external field completely. This is so called the upper limit of electrostatic shielding. In this paper, we simplify this problem as a toy model in which the conductor shell, is illustrated as a pair of parallel metal plates. Through calculation quantitatively, we have found that due to the large amount of free electrons in the metal, any macroscopic conductor devices are far from encountering this upper limit in non-extreme question.

Key words: electrostatic shielding; electrostatic induction; electrostatic balance

(上接9页)

[3] Beller M. The birth of Bohr's complementarity: the context and the dialogues [J]. Studies in History and Philosophy of Science Part A, 1992, 23(1): 147-180.

[4] 胡化凯. 对应原理与矩阵力学的建立 [J]. 大学物理, 1997, 16(12):35-44.

[5] 杨庆余. 海森伯——量子力学的奠基人之一 [J]. 徐州师范大学学报(自然科学版),2002,20(1): 49-53.

[6] Heisenberg W. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen [J]. Zeitschrift für Physik, 1925, 33: 879-893.

[7] Born M, Jordan P. Zur quantenmechanik [J]. Zeitschrift für Physik, 1925, 34: 858-888.

[8] Born M, Heisenberg W, Jordan P. Zur quantenmechanik II [J]. Zeitschrift für Physik, 1926, 35: 557-615.

[9] 黄永义. 量子力学基本概念的发展 [M]. 合肥: 中国科学技术大学出版社,2018: 50-53.

Heisenberg's matrix mechanics

HUANG Yong-yi, SHAO Guo-yun, ZHANG Chun-min

(School of Science, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, Shaanxi 710049, China)

Abstract: The paper recalls the theoretical frame of matrix mechanics, including the fundamental commutation relation, Heisenberg motion equation of operators and non-degenerated perturbation theory. The matrix mechanical treatment of one-dimensional harmonic oscillator is also given.

Key words: quantum mechanics; Heisenberg picture; energy representation