海森伯的魔法与矩阵力学的创立*

吴从军[†]
（西湖大学物理系　新基石科学实验室　杭州　310024）

2024－05－03收到
† email：wucongjun@westlake.edu.cn
DOI：10.7693/wl20240707

矩阵力学是量子力学第一种现代意义上的表述形式，创立于1925年，是在海森伯、玻恩、约当等人的共同努力下完成的。量子力学给人类带来了基础认知层面上的革命，堪称提升了人类文明的层次。量子力学并不是从天上掉下来的，而是脱胎于经典力学和经典电磁辐射理论，通过对经典物理进行改造和重新解释，使之符合实验事实而来。文章旨在帮助读者梳理并理解海森伯等人站在前人的肩膀之上建立矩阵力学的过程，可以作为学习矩阵力学的入门读物。

1　引言

在19世纪和20世纪之交，新的实验事实和经典物理体系之间的矛盾变得尖锐了起来。建立新力学体系的要求变得迫在眉睫，量子力学应运而生。在此过程中，海森伯(Heisenberg)于1925年取得了划时代的突破[1](下文称之为《海森伯1925》)。温伯格(Weinberg)对此有过这样的评价，大意是：好的物理工作往往可以分为两类，一类是智者的工作，另一类是魔法；前者是可以理解的，后者则难以理解，而《海森伯1925》是真正的魔法。

在《海森伯1925》之前，量子物理已经发展了四分之一个世纪之久，成果斐然。量子论源于1900年普朗克(Planck)对黑体辐射的研究；在此之后，经历了1905年爱因斯坦(Einstein)的光子说、1911年玻尔—索莫菲(Bohr—Sommerfeld)的半经典量子化、1924年德布罗意(de Broglie)的物质波等发展阶段。总体来说，当时量子物理尚处于旧量子论(半经典)阶段。新的量子概念嫁接在经典物理的基础之上，彼此之间存在着难以调和的矛盾，离建立一个完善的新力学体系还有不短的距离。

在《海森伯1925》的突破之后，量子物理进入了现代量子力学阶段，开始了雨后春笋般的发展。同年，玻恩(Born)和约当(Jordan)[2]系统地推进了海森伯的思想(下文称之为《玻恩约当1925》)，将其建立在了稳固的数学基础之上。狄拉克建立了量子对易关系和经典泊松括号之间的对应[3](下文称之为《狄拉克1925》)。玻恩、海森伯、约当进一步把《玻恩约当1925》中建立的一维矩阵力学推广到了多维系统[4]。他们的共同努力开创了量子力学的第一种现代表述形式——矩阵力学[5]。

另一方面，薛定谔(Schrödinger)几乎同时在沿着德布罗意物质波的方向进行研究。稍晚于海森伯，他于1926年发表了物质波的波动方程——薛定谔方程，开创了波动力学。矩阵力学和波动力学是现代量子力学最常见的两种表达形式，互相等价。此外，量子力学还有费曼(Feynman)的路径积分形式，此形式在现代量子场论中起到了重要的作用。

在矩阵力学的框架下，求解氢原子的工作由泡利完成，发表于1926年[6]。解出的原子能级和光谱实验的跃迁频率符合得很好，这表明新的力学体系通过了实验的检验。几乎同时，薛定谔也完成了在波动力学的框架下求解氢原子能级的工作。

量子力学的教学往往从波动力学的观点出发，其基本概念(例如波函数)和经典力学差别较大。相比较而言，矩阵力学在最大程度上保留了经典力学和电磁辐射理论的基本概念。《海森伯1925》的题目是“Quantum theoretical reinterpretation of kinematic and mechanical relations”，表明了量子力学和经典理论之间密切的继承关系。

本文将对矩阵力学的创立过程提供一个简明且基本完整的介绍。主要参考文献为文献[1，2]的英文译稿和文献[3]，以及后世的文献解读[7，8]。

本文后面部分的结构解释如下：第2部分回顾必要的经典物理学背景知识，包括经典力学和经典电磁辐射理论；第3部分回顾1925年之前的旧量子论及相关的背景，包括黑体辐射、原子光谱、玻尔半经典理论等；第4和第5部分是本文的核心，分别介绍两篇名作《海森伯1925》和《玻恩约当1925》，给读者演示这两篇划时代的论文是怎样创立矩阵力学的；第6部分介绍《狄拉克1925》中的要点，即正则

* 国家自然科学基金(批准号：12234016)、新基石科学基金资助项目

量子化；第7部分总结全文。

本文不是物理学史的研究工作，所以并不追求和原始文献字面上的一致。为了方便读者，本文尽量使用当代物理的语言和符号习惯，对原始文献进行了重新表达。在不影响理解物理图像的原则下，略去了原始文献中比较繁杂的部分。本文的主要内容曾以讲座的形式通过蔻享线上直播并可回放观看[9]；相关的科普内容曾在“高山科学经典”读书活动中做过线上讲座[10]。

2 经典物理的回顾

2.1 作用量和相角

一个经典力学的周期运动，可以用作用量和相角(J,θ)来描述，它们是一对共轭的广义动量和坐标。在量子化的过程中，这个方法起到了至关重要的作用。下面以一维简谐振子为例来简单地介绍。

我们用动量p和坐标x来描写简谐振子的状态，其哈密顿量为$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$。对于保守系统来说，哈密顿量是守恒量，其值称作能量E。动量和坐标构成的二维空间称为相空间，其中的点(p,x)代表振子的一个状态。如果给定一个初始状态，其时间演化由哈密顿正则方程$\dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$，$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}$来决定。振子的状态在相空间的轨迹形成一个圆，可以由相角$\theta = \omega t$为参数来表示，

$$p/p_0 = \cos\theta,\ x/A = \sin\theta \quad , \tag{1}$$

其中A是振幅，$p_0 = m\omega A$。

在一个周期里面，相角θ变化了2π。相应的轨道在相空间中所围的面积叫做作用量J，由下式定义，

$$J = \oint p\,\mathrm{d}x/2\pi \quad . \tag{2}$$

对于一维谐振子，很容易得到能量和作用量的关系：$E = J\omega$。

在经典物理中，当振子静止的时候，相空间的轨迹圆就缩成了一个点。我们将看到，在量子力学里面，此圆的面积有个最小的值，不可以小到零。

对于一般的封闭轨道的周期运动来说，$J(E)$是E的单变量增函数，通过求解反函数，哈密顿量可以表示成J的单变量函数$H(J)$。相应的哈密顿方程变为

$$\dot{J} = \frac{\partial H}{\partial \theta} = 0,\ \dot{\theta} = \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}J} = \omega \quad , \tag{3}$$

第一个方程表示J守恒，第二个方程表示$\omega = \mathrm{d}E/\mathrm{d}J$，其中$\omega$不再是常数。

(J,θ)通过正则变换和(p,x)相联系，即$p\mathrm{d}x = -\theta\,\mathrm{d}J + \mathrm{d}S(x,J)$。该变换的生成函数$S(x,J) = \int^x p(q,J)\,\mathrm{d}q$，即动量沿着一条轨道对坐标进行积分，而该轨道的作用量为J。这给出$p = \left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)_J$，$\theta = \left(\frac{\partial S}{\partial J}\right)_x$。

2.2 麦克斯韦电磁辐射理论

经典物理的一个代表成就是麦克斯韦电磁场理论，该理论预言了电荷振荡产生电磁辐射。电偶极振荡的辐射功率P和加速度a的关系，可以通过简单地量纲分析而得到：

$$[\text{功率}] = \frac{[\text{能量}]}{[\text{时间}]} = [\text{电荷}]^2\left(\frac{[\text{时间}]}{[\text{长度}]}\right)^3\left(\frac{[\text{长度}]}{[\text{时间}]^2}\right)^2 \quad , \tag{4}$$

由此可得$P \sim \frac{e^2}{c^3}a^2$。这与经典电磁辐射理论给出的结果是一致的，只差一个值为2/3的因子。

考虑一个周期运动模式n，其频率为ω_n，将其位移$x_n(t)$做傅里叶分解，得

$$x_n(t) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} x_n(l)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}l\omega_n t} \quad . \tag{5}$$

其发射电磁波的功率频谱为$P_n = \sum_{l=1}^{\infty} P_l(n)$，其中$P_l(n) \sim \frac{e^2}{c^3} l^4 \omega_n^4 \times \left|x_n(l)\right|^2$。频率$\omega_n$本身称作基频，其他频率是$\omega_n$的整数倍，称为倍频。

在1911年，卢瑟福通过实验建立了原子的有核模型，电子绕着原子核转。根据麦克斯韦理论，电子将发射电磁波而损失能量，最终掉到原子核上。但是我们知道原子是稳定的，这是一个在经典物理里面无法解释的矛盾！

3 旧量子论回顾

3.1 黑体辐射

量子的概念起源于1900年普朗克对黑体辐射功率频谱分布的研究。例如，太阳光粗略地说是温度为6000 K的黑体辐射，其辐射功率主要分布在红外和可见光频段。但是根据经典统计物理导出的结果和这个观测是矛盾的。

考虑一个频率为ω的电磁模式。经典能均分定理给出它的平均能量和频率无关，即$u(\omega) = k_\mathrm{B}T$。在高频区，电磁模式的态密度以$\omega^2$增长，所以其辐射功率的分布在紫外区发散，这被称为“紫外灾难”，显然不符合事实。实验结果指出，黑体辐射的频率分布仅在低频极限($\omega \to 0$)符合能均分定理；而在高频极限($\omega \to \infty$)，则呈现出指数衰减，即$u(\omega) \propto \mathrm{e}^{-\frac{\hbar\omega}{k_\mathrm{B}T}}$。这两个极限之间的差别非常大，看起来难以用统一的框架来描写。

普朗克基于其深厚的热力学修养，拟合出普朗克公式，消除了紫外灾难。他把低频区和高频区的电磁模式当作两个子系统，熵最大化

的原则要求它们之间以共同的温度达到热平衡$\left(\frac{\partial S}{\partial u}\right)_V=\frac{1}{T}$。根据$u$和$T$在低频和高频区的不同关系，分别计算$\left(\frac{\partial^2 S}{\partial u^2}\right)_V=\frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{1}{T}\right)$。则可以得到在$\omega\to 0$和$\omega\to\infty$时，$\frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{1}{T}\right)$分别趋近于$-\frac{k_B}{u^2}$以及$-\frac{k_B}{\hbar\omega u}$。这样低频区和高频区就很接近了，可以被统一地拟合，有$\frac{\partial}{\partial u}\left(\frac{1}{k_B T}\right)=-\frac{1}{u(u+\hbar\omega)}$，由此容易解出，

$$u(\omega)=\frac{\hbar\omega}{e^{\hbar\omega/k_B T}-1}\ . \tag{6}$$

基于式(6)很容易导出普朗克公式，不再赘述。

普朗克公式和经典物理是不相容的。要导出式(6)，普朗克发现整数至关重要，即一个电磁波模式的能量不能是连续的，仅可以取分立值$E=n\hbar\omega$ (n为非负整数)，这就是能量量子化。$\hbar\omega$这样的一份能量叫做能量量子。

基于能量量子化，可以推导式(6)如下：该模式的能量为$E=n\hbar\omega\,(n=0,1,2\cdots)$。设$x=\frac{\hbar\omega}{k_B T}$，则玻尔兹曼统计给出$u(\omega)=\hbar\omega\sum_{n=0}^{+\infty}n e^{-nx}/\sum_{n=0}^{+\infty}e^{-nx}=\frac{\hbar\omega}{e^x-1}$.

3.2 原子光谱

对原子光谱的精密测量是建立量子力学的实验基础。人们发现在低频区谱线经常呈等间距排布，这与经典电磁辐射理论的倍频分布是相符的。但是在可见光区和紫外区，谱线分布的间距并不相等，不能用经典电磁辐射理论来解释。此外，人们还发现了奇特的里兹(Ritz)组合法则，

$$\omega_1+\omega_2=\omega_3\ , \tag{7}$$

即两条谱线的频率之和往往是另外一条谱线的频率，这也超出了经典电磁理论的解释范围。

令人惊奇的是，整数在光谱分析中也出现了。人们观测到最简单的氢原子光谱在可见光区有红蓝靛紫四条分立的谱线。巴尔默(Balmer)提出了一个简单的公式，来拟合它们的频率，

$$\omega=\omega_{Ry}\left(\frac{1}{n^2}-\frac{1}{m^2}\right)\ , \tag{8}$$

其中$\hbar\omega_{Ry}=E_{Ry}=13.6\ eV$是里德伯(Rydberg)能量；$n=2$；$m=3,4,5,6$。当$n$取其他整数值时，相对应的谱线系也在实验中被发现，它们处在紫外或红外区。

3.3 玻尔半经典量子论

为了解释氢原子光谱，玻尔提出了半经典的旧量子论。其要点如下。

(1)作用量量子化导致定态

普朗克能量量子化的本质是作用量量子化。对于谐振子，其频率是个常数，这两者是一回事。但是作用量量子化适用于普遍的情况，有

$$J=\frac{1}{2\pi}\oint p\,dx=n\hbar\,(n=1,2,3\cdots\cdots)\ . \tag{9}$$

对于电子绕原子核的运动来说，满足作用量为整数$n\hbar$的轨道才是稳定的，记为定态n。其实(9)式右方可以有一个常数的不确定性，重要的是两个相邻定态的作用量之差为$\hbar$。

(2)定态之间的跃迁导致光的发射或吸收

电子从能量较高的定态跳到能量较低的定态会发光，反之则吸收光。从定态n到m的跃迁频率，正比于它们之间的能量差，

$$\omega_{m\leftarrow n}=\frac{1}{\hbar}(E_n-E_m)\ ,$$

$$P_{m\leftarrow n}=A_{m\leftarrow n}(E_n-E_m), \tag{10}$$

其中$\omega_{m\leftarrow n}=-\omega_{n\leftarrow m}$，$P_{m\leftarrow n}$是辐射功率，$A_{m\leftarrow n}$是从$n$到$m$的跃迁速率。这样就解释了原子光谱的分立性。

从n到m，再从m到k，其能量变化等于直接从n跳到k。这两个发光频率之和，正好是从n到k的发光频率。这样就给了Ritz组合规则一个自然的解释，即

$$\omega_{m\leftarrow n}+\omega_{k\leftarrow m}+\omega_{n\leftarrow k}=0\ . \tag{11}$$

(3)对应原理

量子物理在大量子数的极限下要回归经典物理。考虑从能级n到$n-l$的跃迁，在$n\gg l$的情况下，根据$\frac{dE_n}{dJ}=\omega_n$，得到$\omega_{n-l\leftarrow n}\approx l\omega_n$，这对应于轨道$n$上的经典电磁辐射的$l$阶谐波的频率。相应的，量子辐射功率$P_{n-l\leftarrow n}$对应于上述电磁辐射的$l$阶谐波功率。

玻尔理论取得了丰富的成果，最突出的成就是它在对应原理的指导下导出了氢原子的能级，并给出了氢原子基态的玻尔半径$a_B=\frac{\hbar^2}{me^2}\approx 0.5\ Å$和里德伯能量$E_{Ry}=\frac{me^4}{\hbar^2}$的表达式。玻尔半径是原子物理中长度的自然单位，是个极为重要的物理量。下面简要介绍这个过程。

在大量子数极限下，根据经典物理开普勒问题的结果，能量由椭圆轨道的半长轴a决定。设a是n的函数，根据维里定理(Virial theorem)有$E_n=-\frac{e^2}{2a_n}$。然后，我们有$\omega_n=\frac{1}{\hbar}\frac{dE_n}{dn}=\frac{e^2}{2a_n^2}\frac{1}{\hbar}\frac{da_n}{dn}$。根据开普勒第三定律$\omega_n=\frac{e}{m^{1/2}a_n^{3/2}}$，可得$\frac{da_n}{dn}=\frac{2\hbar}{em^{1/2}}a_n^{1/2}$，由此解出$a_n=a_B(n+C)^2$

以及 $E_n = -E_{\rm Ry}\frac{1}{(n+C)^2}$，其中$C$是一个待定的常数。通过和光谱线的对比，可以定出$C=0$。

当然，需要看到玻尔理论有着浓厚的经典痕迹，是个过渡性的理论。比如，电子绕着原子核运动的轨道图像，就是把行星轨道的经典概念外推到原子内部所致。在微观世界里面，这是没有实验证据的。

4 海森伯的魔法

《海森伯1925》堪称魔法，其出发点却是很朴素的，即要把理论建立在可观测量的基础之上(图1)。实验上观测的光谱是不同态之间的跃迁，那么构建理论也应该使用态与态之间的关系。解释如下。

4.1 对坐标、运动方程、量子化条件的重新解释

(1)第一步将电子坐标$\boldsymbol{x}$解释成初态和末态之间的关系

考虑一个原子的发光过程：它对应于初态n到末态$n-l$的跃迁，其中$l>0$。x表示为

$$x_{n-l,n}(t) = x_{n-l,n}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n-l\leftarrow n}t}, \quad (12)$$

这样x就被表示成了一个二维数组。在经典电磁辐射理论里，电子的振荡频率就是其发光频率，这个特征被保留了下来。

式(12)可以建立与式(5)经典轨道运动$x_n(t)$中傅里叶频谱分量的对应，可以采取$x_{n-l,n}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n-l\leftarrow n}t} \leftrightarrow x_n(l)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}l\omega_n t}$。对于$l=0$，则$x_{n,n}$对应于式(5)中不含时的部分，应取实值。

再考虑光吸收过程，即$l<0$。根据频率对应关系，得出$x_{n,n-|l|}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n\leftarrow n-l}t} \leftrightarrow x_n(-|l|)\mathrm{e}^{\mathrm{i}|l|\omega_n t}$(注意要采取$\omega_{n,n-l} = -\omega_{n-l,n}$，而不是$\omega_{n+l,n} = -\omega_{n-l,n}$。后者一般并不成立。)

在经典关系中，x取实值，因此有$x_n(-l) = x_n^*(l)$；相对应的，量子关系中有$x_{nm} = x_{mn}^*$。

(2)第二步重建$\boldsymbol{x}^2$和$\boldsymbol{x}$的关系

x^2和辐射功率直接相关，能否自洽地推导出x^2，是这个方案能否成功的关键。

在Ritz组合法则的启发下，海森伯把第一个x的末态和第二个x的初态等同起来作为共同的中间态，这样合起来的指数因子只依赖第一个x的初态和第二个x的末态。然后对所有可能的中间态一视同仁，进行求和，则得到

$$(x^2)_{mn}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{m\leftarrow n}t} = \sum_k x_{mk}x_{kn}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega_{m\leftarrow k}+\omega_{k\leftarrow n})t}. \quad (13)$$

这实际上就是矩阵乘法。海森伯在不具备矩阵知识的情况下，将其发明了出来，令人钦佩不已。类似的，可以接着定义高阶幂次x^n。

(3)第三步重新解释牛顿方程

牛顿运动方程的形式被保留不变，即$\ddot{x}+f(x)=0$，但是其中的x及其幂次需要做矩阵化的解释。

(4)第四步重新解释玻尔量子化条件

这一步将式(9)表示成坐标矩阵元之间的关系。在经典意义下的玻尔量子化条件，可以表示成$\frac{m}{2\pi}\oint \dot{x}^2\,\mathrm{d}t = n\hbar$。把式(5)对时间求导后代入此式，则得到$\sum_{l=-\infty}^{+\infty} l^2\omega_n\left|x_n(l)\right|^2 = n\frac{\hbar}{m}$。在$n\to\infty$的极限下，假定求和中起主要贡献的谐波阶次满足$|l|\ll n$，再把$n$视为连续变量，则得到$\sum_{l=-\infty}^{+\infty} l\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}n}(l\omega_n)\left|x_n(l)\right|^2 = \frac{\hbar}{m}$。把上式中的$l\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}n}$恢复成差分，则其变成$\sum_{l=-\infty}^{+\infty}(l\omega_{n+l}|x_{n+l}(l)|^2 - l\omega_n|x_n(l)|^2) = \frac{\hbar}{m}$。根据经典量子的对应关系，将$l$取正值和负值的部分合并，则得到

$$\sum_{l=0}^{+\infty}(\omega_{n\leftarrow n+l}|x_{n+l,n}|^2 - \omega_{n-l\leftarrow n}|x_{n,n-l}|^2) = \frac{\hbar}{2m}. \quad (14)$$

海森伯进一步假定式(14)对任意量子数均成立。

式(14)其实就是*f*-sum rule (频率求和规则)，其原始推导可以参考文献[11]。《玻恩约当1925》采用了更简洁的正则对易关系$[p,x]=\hbar/\mathrm{i}$取代了该式，它们彼此相等价。如果假定了正则对易关系，可以通过计算双重对易关系得到式(14)。对于形如$H=\frac{p^2}{2m}+V(x)$的哈密顿量，可以证明如下。

直接计算可得$[[x,H],x] = \hbar^2/2m$。另一方面，可以证明：

$$\langle n|[[x,H],x]|n\rangle = \sum_{l=-\infty}^{+\infty}|x_{n,n+l}|^2\times\omega_{n\leftarrow n+l} = \sum_{l=0}^{+\infty}(\omega_{n\leftarrow n+l}|x_{n,n+l}|^2 - \omega_{n-l\leftarrow n}|x_{n,n-l}|^2).$$

图1 德国物理学家W. 海森伯。1923年获博士学位“On stability and turbulence of liquid flows”；1925年创立量子(矩阵)力学；1927年提出测不准原理；1928年提出铁磁交换作用理论；1932年提出原子核由质子、中子组成；第二次世界大战后从事湍流和统一场论的研究

由此可得频率求和规则。

经过上面四步，一个新的力学体系就草创起来了。

4.2 简谐振子

海森伯用他的新力学求解了非谐振子的能谱，在技术上具有相当的挑战性。为了尽量简洁地演示新力学的不同凡响，我们采用一维简谐振子的运动方程，已经可以达到目的。例如，海森伯发现了一个令人吃惊的结论——零点振动。解释如下。

把 x 作矩阵解释后，谐振子的运动方程变成了 $(\omega_0^2-\omega_{n\leftarrow n\pm l}^2)\times x_{n,n\pm l}=0$。要想有非零矩阵元，只能有 $\omega_{n\leftarrow n\pm l}=\pm\omega_0$。对于一维运动，其能量是作用量的增函数，没有简并。可以分析出最多只有一个 l 使得 $x_{n,n+l}\neq 0$，因为如果 l 和 k 使得 $\omega_{n\leftarrow n+l}=\omega_{n\leftarrow n+k}=\omega_0$ 的话，则 $l=k$；同理最多只有一个 l' 使得 $x_{n,n-l'}\neq 0$。在 $n\to+\infty$ 的极限下，根据对应原理有 $\omega_{n\leftarrow n\pm 1}=\pm\omega_0$，则 $x_{n,n\pm 1}\neq 0$。因为简谐振子的频率和振幅无关，此关系应该在小量子数的情况下仍然成立。

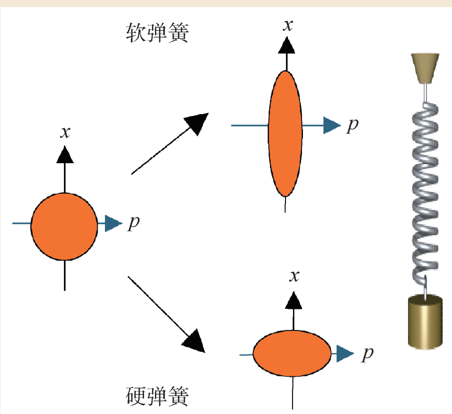

图2 量子振子的零点振动。振子在相空间轨迹圆的最小面积为 $\frac{1}{2}h$，为海森伯测不准原理不等式的下限。如果改变振子的弹簧系数，则圆被挤压成了椭圆，但是其面积保持不变。如果弹簧变软一点，则振子的速度变慢，其动量更精确了；但是振幅变大，位置更不确定了。反之，如果弹簧变得硬一些，则振幅变小，位置变得更加精确了；但是其动量变大，也更不确定了

对于谐振子，量子化条件式(14)给出 $\frac{\hbar}{2m}=\omega_0(|x_{n+1,n}|^2-|x_{n,n-1}|^2)$。由于 $\left|x_{n+1,n}\right|^2$ 的正定性，此递推关系不能一直往下走，即 n 有下界。不失一般性，把这个下界的指标记作 $n=0$，其对应的态是基态。由此可得 $|x_{1,0}|^2=\frac{\hbar}{2m\omega_0}$，然后经递推得到 $|x_{n+1,n}|^2=\frac{\hbar}{2m\omega_0}(n+1)$。设 x 的矩阵元是实的，可得：

$$\begin{aligned} x_{n+1,n}&=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}(n+1)}\ , \\ x_{n-1,n}&=\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}n}\ ,\quad (n\geq 1)\ . \end{aligned} \tag{15}$$

考虑玻尔量子化条件式(9)的对角矩阵元。由 $J=\frac{m}{2\pi}\oint(\dot{x}_{nn})^2\,\mathrm{d}t$ 可得，

$$J=\frac{m}{2\pi}\omega_0^2\oint\left(|x_{n,n+1}|^2+|x_{n,n-1}|^2\right)\mathrm{d}t =\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\ . \tag{16}$$

根据 $\omega=\mathrm{d}E/\mathrm{d}J$ 可以得出 $E=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega$。振子在基态的能量也不为零，其相应的运动称为零点振动。

零点振动可以借用半经典图像来理解。振子在相空间的轨迹是个圆，有最小的面积。它在基态中的位置和动量是不能完全确定的，被限制在这个圆的范围内。这个圆可以变形成椭圆，但是椭圆的面积是不变的，不可能同时提高对坐标和动量的测量精度(图2)。

海森伯测不准原理表明坐标和动量的不确定度满足不等式 $\Delta x\cdot\Delta p\geq\frac{\hbar}{2}$。谐振子基态满足测不准原理的下限，即 $\Delta x\cdot\Delta p=\frac{\hbar}{2}$，被称为相干态，是最接近经典物理的量子态。

5 矩阵力学的成型

在海森伯捅破了这层窗户纸之后，矩阵力学的发展可以说是突飞猛进，短短一年就几乎成型。玻恩意识到海森伯魔法的数学本质是把坐标解释成了矩阵。《玻恩约当1925》系统地阐述了用矩阵来表示力学量的思想，提出了一系列基本假设，建立了几个基本定理，建构了矩阵力学的框架。(海森伯取得突破的时候还不了解矩阵。当时线性代数对于物理学家来说还是比较陌生的数学工具。)

5.1 厄密矩阵表示力学量

在经典力学的哈密顿形式中，动量和坐标的地位是对等的。很自然的，《玻恩约当1925》提出了**基本假设：动量和坐标都应当表示为矩阵**，即 $p_{mn}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{m\leftarrow n}t}$，$x_{mn}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{m\leftarrow n}t}$。任意三个态之间的时间因子中，其频率满足Ritz组合规则的物理解释，见式(11)。

动量和坐标组成了力学量的完备集，即所有经典力学量 $O(p,x)$ 原则上可以表示成 p 和 x 的幂级数，都可以用矩阵来表示。把经典力学量 O 做傅里叶展开，$O=\sum_l O_n(l)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}l\omega_n t}$。其经典傅里叶频谱和量子矩阵元的对应关系为

$$O_n(l)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}l\omega_n t}\leftrightarrow O_{n-l,n}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n-l\leftarrow n}t}\ . \tag{17}$$

根据矩阵乘法规则，所有力学量的时间指数因子都是一致的，即 $O_{mn}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{m\leftarrow n}t}$。力学量矩阵被要求是厄密的，满足 $O_{mn}=O_{nm}^*$。

p和x不对易，因此在把经典力学量$O(p,x)$量子化时，要做对称化处理，使其成为厄密矩阵。

5.2　正则对易关系的建立

《玻恩约当1925》提出**基本假设，动量和坐标对易关系的对角矩阵元**$(px-xp)_{nn}=\hbar/\mathrm{i}$(图3)。

《海森伯1925》中已经提到了坐标和速度的乘积依赖于它们之间的顺序。这是矩阵乘法的普遍现象，称作不对易性。玻恩进一步发现，量子化条件式(14)可以等价地表述成上面的假设。简单证明如下

$$(px-xp)_{nn}=-2m\mathrm{i}\times\left(\sum_{l>0}\omega_{n\leftarrow n+l}|x_{n+l,n}|^2-\omega_{n-l\leftarrow n}|x_{n,n-l}|^2\right)=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\ ,$$

其中$p=m\dot{x}$。

随后，约当证明了该对易关系的非对角矩阵元为零。大致的证明思路如下，设$g=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p,x]$，先论证$g$是守恒量，即$\dot{g}=0$。下面计算$\dot{g}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}[p,x]$，其中$\dot{p}$和$\dot{x}$按下文中的基本假设式(20)给出。为简单计，假定哈密顿矩阵可以分成两部分，每个部分只是p或x的函数,即$H=H_1(p)+H_2(x)$，则

$$\dot{g}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(-\frac{\partial H_2(x)}{\partial x}x+x\frac{\partial H_2(x)}{\partial x}-\frac{\partial H_1(p)}{\partial p}p+p\frac{\partial H_1(p)}{\partial p}\right)=0\ . \quad (18)$$

如果H中存在p和x的混合，为保持H的厄密性，要对p和x的所有可能顺序作对称化处理。例如，如果H是n个p和m个x的乘积，记作$H=\frac{1}{m+n}\{p^n,x^m\}_s$，其中包括了在$m+n$个位置上放置$n$个$p$和$m$个$x$的所有位型，共有$\binom{m+n}{m}$项。可以证明：

$$\dot{g}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(x\{p^n,x^{m-1}\}_s+p\{p^{n-1},x^m\}_s-\{p^n,x^{m-1}\}_s x-\{p^{n-1},x^m\}_s p\right)=0\ .$$

证明需要用到下列恒等式，留给有兴趣的读者作练习。

$$\frac{\partial}{\partial p}H=\{p^{n-1},x^m\}_s\ ,$$

$$\frac{\partial}{\partial x}H=\{p^n,x^{m-1}\}_s\ ,$$

$$x\{p^n,x^{m-1}\}_s+p\{p^{n-1},x^m\}_s=\{p^n,x^m\}_s\ ,$$

$$\{p^n,x^{m-1}\}_s x+\{p^{n-1},x^m\}_s p=\{p^n,x^m\}_s\ .$$

因为$\dot{g}=0$，则g所有的非对角矩阵元为零，否则将会出现$g_{mn}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{m\leftarrow n}t}$的非对角项随时间变化。这样，我们就得到了著名的正则对易关系$g=1$，即

$$px-xp=\hbar/\mathrm{i}\ . \quad (19)$$

在现代量子力学中，这个关系取代了玻尔量子化条件，成为量子力学的基石。这里假设了如果$m\neq n$，则$\omega_{m\leftarrow n}\neq 0$，即没有简并。如果有能级简并的话，可以在几个简并能级的子空间中将g对角化，这样就不存在非对角矩阵元了。

5.3　动力学演化

《玻恩约当1925》对于动量和坐标的时间演化问题，也做了**基本假设：哈密顿正则方程的形式不变，**

$$\dot{p}=-\frac{\partial}{\partial x}H(p,x)\ ,\quad \dot{x}=\frac{\partial}{\partial p}H(p,x) \quad (20)$$

但是要以矩阵的方式来解释。哈密顿矩阵开始出现在量子力学中，它是经典哈密顿量的量子表达。

根据这个假设，可以更简洁地把动量和坐标的时间演化表示成其与哈密顿量矩阵的对易关系，

$$\dot{p}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p,H],\ \dot{x}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]. \quad (21)$$

式(21)的证明思路如下：假定

图3　M. 玻恩的墓碑。玻恩是矩阵力学的奠基者之一，他提出了正则对易关系，后来刻在了他的墓碑上。他还提出了量子力学波函数的统计诠释。他与黄昆先生合著的《晶格动力学》是固体物理的经典著作

哈密顿矩阵可以表示成$H=H_1(p)+H_2(x)$。考察$\dot{p}=-\frac{\partial}{\partial x}H_2(x)$，设$H_2=\sum_n a_n x^n$，容易得出$\dot{p}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p,H]$。证明过程中需要用到对易关系：

$$[p,x^n]=\sum_{i=0}^{n-1}x^i[p,x]x^{n-i-1}=-\mathrm{i}\hbar x^{n-1}\ .$$

类似的，也可以得出$\dot{x}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x,H]$。对于$H$包含$p,x$混合乘积的情况，式(21)可以采取类似于式(18)的方式证明，较为繁琐，这里从略。

如果两个力学量g_1和g_2的时间演化都可以表示成其与哈密顿量矩阵的对易关系，很容易证明它们乘积的演化也是这样，即$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(g_1g_2)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[g_1g_2,H]$。由此，任何力学量$O$，都可以表示成$p$和$x$的幂级数，其时间演化也可以表示成与哈密顿量矩阵的对易关系，

$$\dot{O}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[O,H]\ . \quad (22)$$

此式在教材中一般称作海森伯运动方程，其实是《玻恩约当1925》中的结果。

5.4 哈密顿量和能量守恒

玻恩、约当论证了哈密顿量矩阵H是对角的。对于一个保守力学系统，哈密顿量$H(p,x)$不显含时间，代入式(22)，即得$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}H=0$。采用与论证正则对易关系的非对角元为0相类似的方法，可得H是对角的。(用现代的量子力学语言，玻恩、约当当时采用的是能量表象，也就是以哈密顿量本征态为基的表象。当然也可以采用其他表象，在那些表象中，H就不再是对角的了。)

《玻恩约当1925》提出**基本假设：$H_{nn}=E_n$，即哈密顿量矩阵的对角元为定态能级n的能量。**

在矩阵力学的框架内，玻尔理论的跃迁频率假设就不必当成是基本假定了。把式(22)展开，有$\hbar\omega_{m\leftarrow n}O_{mn}=(H_{nn}-H_{mm})O_{mn}$，即可得：

$$\hbar\omega_{m\leftarrow n}=E_n-E_m\ , \tag{23}$$

这样力学量O的时间演化为$O_{mn}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(E_n-E_m)t/\hbar}$。能级跃迁的频率即初末态之间能量差除以普朗克常数。

6 正则量子化

《狄拉克1925年》指出：**在经典极限下，两个力学量的量子对易关系对应于它们的经典泊松括号。**只要把泊松括号变成量子力学量的对易关系，就完成了从经典到量子的转换，这个过程叫正则量子化。

经典力学的哈密顿形式非常优美，其中的一个体现就是泊松括号，记作：

$$\{f_1,f_2\}_{p,x}=-\frac{\partial f_1}{\partial p}\frac{\partial f_2}{\partial x}+\frac{\partial f_1}{\partial x}\frac{\partial f_2}{\partial p}\ ,$$

其中p和x为一组正则动量和坐标。泊松括号不依赖正则动量和坐标的选择。例如，也可以用(J,θ)为共轭力学量来定义泊松括号，结果完全等价：$\{f_1,f_2\}\equiv\{f_1,f_2\}_{J,\theta}=\{f_1,f_2\}_{p,x}$。以下使用泊松括号将不再标注其依赖的共轭变量。

证明上述关系，需要用到雅可比行列式$\frac{\partial(p,x)}{\partial(J,\theta)}=\frac{\partial p}{\partial J}\frac{\partial x}{\partial\theta}-\frac{\partial p}{\partial\theta}\frac{\partial x}{\partial J}=1$的结论，可以如下导出。$p=\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)_J$，$\theta=\left(\frac{\partial S}{\partial J}\right)_x$，其中$S$是变换的生成函数，满足$p\mathrm{d}x=-\theta\mathrm{d}J+\mathrm{d}S(x,J)$，则

$$\frac{\partial(p,x)}{\partial(J,\theta)}=\frac{\partial(p,x)}{\partial(J,x)}\frac{\partial(J,x)}{\partial(J,\theta)}=\frac{\left(\frac{\partial p}{\partial J}\right)_x}{\left(\frac{\partial x}{\partial\theta}\right)_J}=\frac{\partial^2}{\partial J\partial x}S/\frac{\partial^2}{\partial x\partial J}S=1。$$

利用泊松括号，哈密顿正则方程可以表述成$\dot p=\{p,H\}$，$\dot x=\{x,H\}$。经典力学量$O(p,x)$如果不显含时间，其时间演化可以表示为

$$\dot O=\{O,H\}\ . \tag{24}$$

下面以动量和坐标为例，论证其量子对易关系和经典泊松括号的对应。考虑矩阵元$[p,x]_{n,n-l}$，其中n对应于经典作用量$J=n\hbar$，经典角度变量为$\theta=\omega_n t$。在$n\to+\infty$的极限下，可得

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[p,x]_{n,n-l}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n\leftarrow n-l}t}=\frac{\partial}{\partial J}(p_{n,n-k}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n\leftarrow n-k}t})\frac{\partial}{\partial\theta}(x_{n-k,n-l}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n-k\leftarrow n-l}t})$$
$$-\frac{\partial}{\partial J}(x_{n,n-(l-k)}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n\leftarrow n-(l-k)}t})\frac{\partial}{\partial\theta}(p_{n-(l-k),n-l}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n-(l-k)\leftarrow n-l}t})\ ,$$

其中l,k取有限值，满足$n\gg l,k$。

上式可以如下得到，利用

$$[p,x]_{n,n-l}=\sum_k\left[(p_{n,n-k}-p_{n-(l-k),n-l})x_{n-k,n-l}-(x_{n,n-(l-k)}-x_{n-k,n-l})p_{n-(l-k),n-l}\right]\ ,$$

将其表示成对J微分后可得：

$$\frac{1}{\hbar}[p,x]_{n,n-l}=(l-k)\frac{\partial}{\partial J}p_{n,n-k}x_{n-k,n-l}-k\frac{\partial}{\partial J}x_{n,n-(l-k)}p_{n-(l-k),n-l}\ .$$

再在此式中，恢复力学量的时间指数因子，将其表示成对θ的微分。

根据量子经典对应关系式(17)，可以得到，

$$\sum_k\left[\frac{\partial}{\partial J}p_n(-k)\frac{\partial}{\partial\theta}x_n(-l+k)-\frac{\partial}{\partial J}x_n(-l+k)\frac{\partial}{\partial\theta}p_n(-k)\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\omega_n t}=O_n(-l)\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\omega_n t}\ ,$$

其中忽略了量子数n附近能级的经典频率与ω_n的差别。此中，O_n是经典力学量O对应于能级n的经典傅里叶频谱；其中O定义为

$$O=\frac{\partial}{\partial J}p\frac{\partial}{\partial\theta}x-\frac{\partial}{\partial J}x\frac{\partial}{\partial\theta}p=-\{p,x\}.$$

上述推导对任意力学量f_1, f_2都成立。至此，经典力学和矩阵力学的对应关系已经建立，

$$\left\{f_1,f_2\right\} \leftrightarrow \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[f_1,f_2\right]. \quad (25)$$

特别的，矩阵力学量的时间演化方程式(22)与其经典表达式(24)正符合这个对应。

7 结语

物理学研究物质和时空的基本原理，具有严密的体系。在建立新理论体系的过程中，物理学家的内心是充满挣扎的。一般来说，因为旧体系已经经过了长期的检验，将其全然否定并不明智。矩阵力学的创立过程充分体现了这一点，经典物理并没有被抛弃，而是作为量子物理的宏观极限而存在。量子和经典的对应，直接指导了量子力学的建立。

《海森伯1925》革命性地提出了把坐标建立在电子跃迁的初末态之间的思想，保留了经典运动方程的形式，并对之进行了量子解释，得到了令人惊奇的谐振子零点振动。《玻恩约当1925》在此基础上进行了系统性的发展，包括用厄密矩阵来表示力学量、提出正则对易关系、建立力学量的时间演化方程、对哈密顿量对角元作定态能量的解释等。这样矩阵力学就初步成型了。《狄拉克1925》则提供了对经典体系进行量子化的一般方法，称为正则量子化，只需要把经典泊松括号对应到量子力学对易关系即可。

创立波动力学的关键文献还有玻恩、海森伯、约当发表于1926年的论文[4]。本文就不进行仔细介绍了。简单地说，此文把《玻恩约当1925》中建立的一维矩阵力学拓展到了高维，并发展了微扰论。特别的，此文把能级的求解问题和厄密矩阵本征值问题作了对应。例如，对于非谐振子问题，可以把简谐部分H_0的对角矩阵作为基础，以非谐部分H'为微扰，其矩阵元可以通过坐标矩阵的运算而得。建立久期方程之后，将其对角化即可求得能量的非谐修正。

在人类历史上，即使在以万年计的时间尺度上，量子力学的建立也是不可磨灭的丰碑。它使得人类获得了描述微观粒子行为的能力，从而使得对微观粒子的控制达到了前所未有的水平。例如，现代的电子工业就建立在对半导体中电子运动的精密控制之上。各种新奇物态，包括超导、超流、磁性等，其根源也是大量电子的量子行为在宏观层面的集体体现。

在矩阵力学建立38年后，科学史专家库恩(T. Kuhn)对海森伯进行了访谈。海森伯回忆往事，说了下面这段话，形象地反映出在新力学的创建过程中摸索和顿悟的场景：“你想爬某个山峰，……你有地图……但是仍坠入雾中!……忽然你模糊地，只在数秒钟的功夫，看到一些形象，你说：‘哦，这就是我要找的大石!’……虽然你仍不知道你能不能爬到那块大石，但是那一瞬间你说：‘我现在知道我在什么地方了!……然后就知道该如何前进了!’”

在量子力学诞生即将百年之计，谨以此文向开创量子时代以及建立现代量子力学的诸多前辈物理学家致以崇高的敬意。

致 谢 感谢北京大学陈徐宗教授。他发给作者的文献[5](其中包含了原始文献[1, 2, 4, 6]的英译本)，以及他和作者的讨论，对本文的写作大有帮助。感谢复旦大学金晓峰教授、西湖大学吴颉教授的帮助。

参考文献

[1] Heisenberg W. Z. Phys.，1925，33：879. 英文翻译见文献 [5]书中所附的文献 [12]

[2] Born M，Jordan P. Z. Phys.，1925，34：858. 英文翻译见文献[5]书中所附的文献[13]

[3] Dirac P A M. Proc. R. Soc. London，Ser. A，1925，109：642

[4] Born M，Heinserberg W，Jordan P. Z. Phys.，1926，35：557. 英文翻译见文献[5]书中所附的文献[15]

[5] van der Waerden B L. Sources of Quantum Mechanics. New York：Dover，1968

[6] Pauli W. Z. Phys.，1926，36：336. 英文翻译见文献[5]书中所附的文献[16]

[7] Aitchson I J R，MacManus D A，Snyder T M. Am. J. Phys.，2004，72：1370

[8] Fedak W A，Prentis J J. Am. J. Phys.，2009，77：128

[9] 吴从军. Heisenberg，Born，Jordan创建量子力学的代表作. https://www.koushare.com/live/details/24779

[10] 吴从军. 保守的革命者—《物理学与哲学》导读. 见：高山科学经典导读视频号

[11] Kuhn W. Z. Phys.，1925，33：408. 英文翻译见文献[5]书中所附的文献[11]