量子力学

绪言

杨焕雄

中国科学技术大学物理学院

hyang@ustc.edu.cn

September 10, 2023

目录

1. 一般性资讯
   - 教师与助教
   - 作业与考试计划
2. 绪言
   - 玻尔旧量子论
   - 矩阵力学的诞生

欢迎同学们来到本课堂学习

量子力学

几句说在课前的话

任课教师信息:

姓名:杨焕雄
电话:18949882795
邮箱:hyang@ustc.edu.cn
教学经历:此次教学是本人第 13 次主讲本科生的量子力学.

课程助教:

1. 陈阳, 13894541869, ustccy@mail.ustc.edu.cn
2. 谢予晗, 18921205018, xzh1006@mail.ustc.edu.cn

教材:

J. Sakurai, et al, *Modern quantum mechanics*, 2e, CUP, 2017.

参考书推荐

1. 钱伯初, 量子力学, 高等教育出版社, 2006 年 1 月.
2. 张永德, **量子力学**(第四版), 科学出版社, 2019 年 8 月.
3. J. Sakurai, et al, *Modern quantum mechanics*, 3e, CUP, 2021.
4. J. Townsend, *A modern approach to quantum mechanics*, 2e, University Science Books, 2012.
5. C.Cohen-Tannoudji et al, *Quantum mechanics*, 2e, Wiley, 2020.
6. D.Griffiths, *Introduction to quantum mechanics*, 3e, CUP, 2018.
7. P.Kok, *A first introduction to quantum physics*, Springer, 2018.
8. J. Zamastil, *Understanding the path from classical to quantum mechanics*, Springer, 2023.
9. P.Kaye, *An introduction to quantum computing*, OUP, 2007.
10. G.Auletta et al, *Quantum mechanics for thinkers*, Pan Stanford, 2014.

量子力学史话

上帝掷骰子吗
量子物理史话
曹天元
—著—
十年经典畅销
升级版
科学时报读书杯
最佳科普创作奖
第三届
吴大猷科普奖
国家图书馆
文津图书奖
一群人类的超强大脑，
爱因斯坦、普朗克、薛定谔、霍金……
先颠覆自己的三观，
再颠覆整个世界！
十年经典畅销，数百万读者惊呼
太过瘾了！原来物理这么燃
人人都能读懂的量子物理课
北京联合出版公司

曹天元, 男, 1981 年出生于上海, 复旦大学和香港大学毕业. 除科普之外, 长期从事金融投资和媒体工作, 代表作《上帝掷骰子吗》.

作业与考试的计划:

1. 课程正式开始后,每周约布置 3 道左右习题 (有例外). 尽可能不采用 Sakurai 原著上的题目 (**因为存在诱人放弃独立思考的题解**).
2. 作业将作为平时成绩的一部分评分. 建议助教把评分标准落实在是否独立完成, 习题答案的正确与否不作过分强调.
3. 平时成绩也包括对课堂提问的参与. 平时成绩比重为 20%.
4. 考试分期中考试(闭卷)和期终考试两次(期终开卷, 会包含教学组其他老师所命试题), 比重分别为 20% 和 60%.

提示:

考题的难易程度与作业持平、但不会考平时作业中布置过的习题原题. **考题命题的原则是:** 只要考生平时学习中认真听讲、积极复习、独立完成作业, 就可以取得 75 分以上的好成绩.

教学特点:

自我评价:

1. 通俗性欠佳, 做不到深入浅出.
2. 语言能力一般, 不会讲故事、不风趣.
3. 普通话水平低下, 许多汉字的发音不准确. 声音不够洪亮 (请大家尽量集中注意力听讲).

以教学内容的取舍论, 量子力学零基础、愿意进行独立思考并在课后钻研老师推荐的参考文献的学生上我的这门课比较合适.

本课程全程使用电子版课件进行教学. 教学课件的学生版会在课堂教学完成后上传到 BB 网上供大家参考.

课件下载网址:
https://www.bb.ustc.edu.cn

教学改革：

传统的量子力学课程一般是从介绍实物粒子的波动性：

- 电子衍射实验
- 德布罗意物质波假设
- 波函数 $\Psi(\boldsymbol{r}, t)$
- 薛定谔方程

$$i\hbar\frac{\partial\Psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r})\right]\Psi(\boldsymbol{r},t)$$

出发组织课堂教学的. 这一方面在组织结构上与原子物理等入门课程有些雷同和重复，容易引起审美疲劳，另一方面也不完全符合量子力学发展的历史真实.

与此不同，本课堂将通过介绍量子力学之父 Heisenberg 的矩阵力学引导大家开始量子力学的学习之旅.

量子力学之父:

Werner Heisenberg(1901-1976) 德国著名物理学家、哲学家.

- 1925 年他建立了矩阵力学, 从而成为量子力学的主要创始人, 1932 年诺贝尔物理学奖金获得者.
- 1927 年他提出的不确定度关系,

$$\Delta x \Delta p \sim h$$

使他成为量子力学哥本哈根学派的代表人物之一, 并跻身于 20 世纪著名哲学家的行列.

Werner Heisenberg, 1901-1976

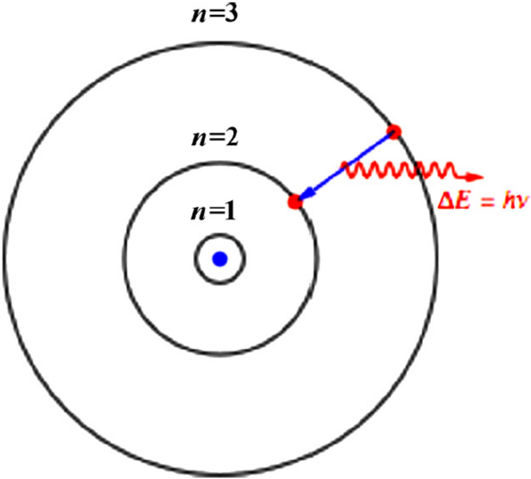
玻尔旧量子力学

为了克服 Rutherford 原子的稳定性困难,玻尔(1913 年)建立了一个改进版的氢原子有核模型:

1. 电子在围绕原子核的稳定轨道上运动. 这些稳定轨道是量子化(离散化)的:
$$\oint p dx = \int_0^T \mu \dot{x}^2 dt = nh, \qquad n \in \mathbb{N}^+$$
或者电子轨道角动量的取值只能是约化普朗克常数 $\hbar$ 的整数倍[1]: $L = n\hbar$.
2. 与经典电动力学的预测相背,电子在稳定轨道上运动时不向外发射电磁辐射.
3. 电子的轨道半径不能连续变化,但可以突变. 突变时伴有电磁辐射的发射或吸收:
$$\nu_{i\rightsquigarrow f} := \nu_{fi} = (E_f - E_i)/h$$

[1] 约化普朗克常数定义为 $\hbar = h/2\pi$, 其取值为:
$$\hbar \approx 1.05 \times 10^{-34} \text{ 焦耳} \cdot \text{秒}$$

Bohr model of hydrogen atom:



玻尔模型的成就与缺陷：

1. 理论上预测了原子的大小：

$$a = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\mu e^2} \approx 0.53 \times 10^{-10} \text{ 米}$$

2. 写出了正确的氢原子能级公式，

$$E_n = -\frac{\mu}{2\hbar^2 n^2}\left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 = -\left(13.6/n^2\right)\ \text{eV}, \qquad n \in \mathbb{N}^+$$

   这个公式是后来 Heisenberg、Schrodinger 等人建立的新量子力学的试金石.

3. 奠定了氢原子光谱频率计算的理论基础.
4. 没有给出氢原子中在稳定轨道上作加速运动的电子不向外发射电磁辐射的理由.
5. 不能预测原子光谱的谱线强度.
6. 很难构造多电子原子的玻尔模型.

玻尔模型最大的成功在于正确地描写了氢原子光谱的频率分布：

$$h\nu_{m \rightsquigarrow n} = h\nu(m,\ n) = E_n - E_m = \frac{\mu e^4}{32\pi^2\hbar^2\epsilon_0^2}\left[\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right]$$

即，

$$\nu(m,\ n) = Rc\left[\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2}\right]$$

式中

$$R = \frac{\mu e^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \approx 1.097 \times 10^7 \ \text{米}^{-1}$$

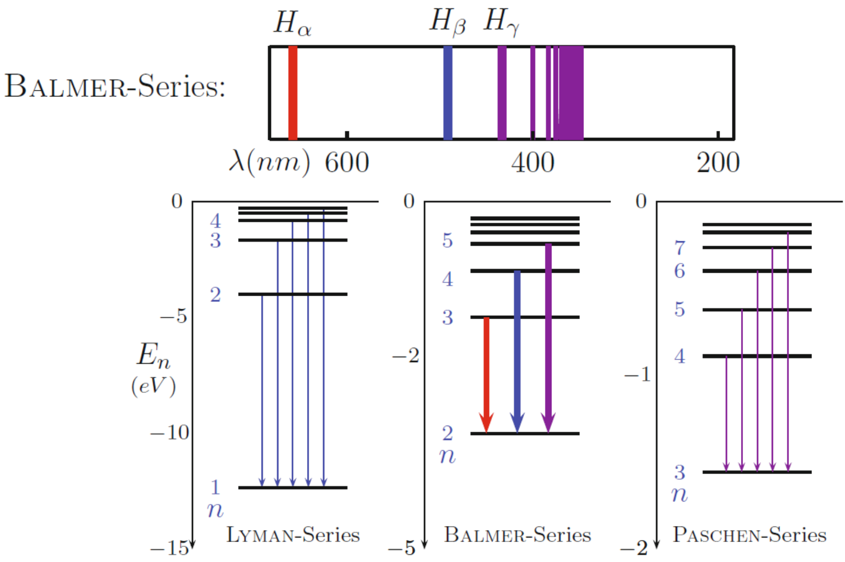
称为 Rydberg 常数. 由此知氢原子的谱线频率服从所谓 Ritz 结合律：

$$\nu(m_1,\ n_2) = \nu(m_1,\ n_1) + \nu(n_1,\ n_2),$$
$$\nu(m,\ n) = -\nu(n,\ m),$$

所以，

$$\nu(n,\ n) = 0$$

Balmer-series of hydrogen atom:



Heisenberg 的顿悟

1925 年, Heisenberg 重新审视了氢原子的玻尔模型.

受马赫原理与 Einstein 创建狭义相对论时对待以太哲学思想的启发, Heisenberg 顿悟到:

量子物理正确的理论描写中只应出现实验上可以测量的物理量.

具体地说,

1. 因为谱线频率是一个实验上可以测量的物理量, 它们应进入到量子理论中. 并且, 新量子力学必须接受 Ritz 结合律的制约.
2. 对于处于定态的氢原子而言, 核外电子是否沿一条确定的轨道运动实际上无法通过实验检验. 因为

$$h\nu(m,n) = E_n - E_m$$

   实验上能够检测的只是电子的轨道差 (能级差). 谱线频率 $\nu(m,n)$ 必须依赖于两个参数.
3. 谱线的强度是一个可观测量, 新量子力学应该有它的一席之地.

在氢原子的玻尔模型中,若核外电子在第 n 个轨道上运动,则其位置矢径可按 Fourier 变换表达为:

$$\boldsymbol{r}(n,\ t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \boldsymbol{a}(n,\ \alpha)\exp[-i\omega(n)\alpha t]$$

为方便计,以下仅考虑电子位置矢径 $\boldsymbol{r}(n,\ t)$ 的一个笛卡尔直角分量:

$$x(n,\ t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} a(n,\ \alpha)\exp[-i\omega(n)\alpha t]$$

式中的 Fourier 展开参数须满足条件

$$a(n,\ \alpha) = [a(n,\ -\alpha)]^*$$

以保证电子位置坐标 $x(n,\ t)$ 的实数性. 按照 $x(n,\ t)$ 的 Fourier 级数,可把玻尔-索莫菲量子化条件

$$nh = \int_0^{2\pi/\omega(n)} \mu[\dot{x}(n,\ t)]^2 dt$$

重新写为:

$$nh = 2\pi\mu \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \alpha^2 \omega(n) \left|a(n,\ \alpha)\right|^2$$

求其对量子数 n 的导数[2], 我们有:

$$h = 2\pi\mu \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \alpha \frac{d}{dn} \left[\alpha\omega(n) \left|a(n,\ \alpha)\right|^2\right]$$

[2]注意到量子数 n 的定义域为正整数, 此处的导数应按差分理解:

$$h = 2\pi\mu \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \left[\alpha\omega(n+\alpha) \left|a(n+\alpha,\ \alpha)\right|^2 - \alpha\omega(n) \left|a(n,\ \alpha)\right|^2\right]$$

Heisenberg 重新审查了玻尔模型中的上述结果.

- 他认为, 既然实验上无法证实电子轨道这个概念, 那么电子的位置坐标 $x(n,\ t)$ 本身及其 Fourier 级数

$$x(n,\ t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} x_{n\alpha}, \qquad x_{n\alpha} = a(n,\ \alpha)\exp[-i\omega(n)\alpha t]$$

实际上都是无意义的, 应该抛弃.

- 受经典电动力学电偶极辐射平均功率[3]

$$P = \frac{e^2}{3c^3}\left|\ddot{x}(n,\ t)\right|^2$$

的启发, 他认为虽然级数 $x(n,\ t)$ 本身无意义, 但其分量 x_{nm} 可用于描写电子在能级 E_n 与 E_m 之间发生自发跃迁, 因此是一个可观测物理量. Heisenberg 建议用

$$P(n,\ m) = \frac{e^2}{3c^3}\left|\ddot{x}_{nm}\right|^2$$

描写光谱线 $\nu(n,\ m)$ 或者 $\nu(m,\ n)$ 的强度.

[3]这里用了高斯单位制.

Heisenberg 的想法可以更准确地小结如下:

- 新的量子力学理论应摒弃实验上无法观测的电子位置坐标 $x(n,\ t)$, 但保持其 Fourier 级数中的所有项

$$\left\{a(n,\ \alpha)\,\mathrm{exp}[-i\omega(n)\alpha t];\ \ \alpha=0,\ \ \pm 1,\ \ \pm 2,\cdots\right\}$$

并做代换

$$\begin{aligned} a(n,\ \alpha) &\ \ \rightsquigarrow\ \ a(n,\ n-\alpha), \\ \omega(n)\alpha &\ \ \rightsquigarrow\ \ \omega(n,\ n-\alpha)=\omega(n-\alpha)-\omega(n) \end{aligned}$$

从而在新量子力学理论中应存在一个数组:

$$\left\{x_{nm}=a(n,\ m)\,\mathrm{exp}[-i\omega(n,\ m)t];\quad n,\ m=0,\ \ \pm 1,\ \ \pm 2,\ \ \cdots\right\}$$

它取代了 Bohr 旧量子力学理论中电子位置坐标 $x(n,\ t)$ 的地位. 换言之, Heisenberg 假设: 电子的位置在新量子力学中应由数组 $\{x_{nm}\}$ 表示.

- 谱线 $\nu(n, m)$ 的强度可用电子在能级 E_n 与 E_m 之间发生自发跃迁的辐射功率表征:

$$P(n, m) = \frac{e^2}{3c^3}[\omega(n, m)]^4 |x_{nm}|^2$$

因此，可以把 x_{nm} 或 $a(n, m)$ 诠释为此跃迁过程发生的概率幅.

- 两条谱线 $\nu(n, m)$ 与 $\nu(m, n)$ 应具有相同的强度[4]，$|x_{nm}|^2 = |x_{mn}|^2$. 从而 $x_{mn} = x_{nm}e^{i\theta}$ 或者 $x_{mn} = x^*_{nm}e^{i\theta}$，此处 $\theta \in \mathbb{R}$. 因为

$$x_{nm} = a(n, m)\exp[-i\omega(n, m)t],$$

而

$$\exp[-i\omega(m, n)t] = \exp[i\omega(n, m)t] = \{\exp[-i\omega(n, m)t]\}^*$$

所以 $x_{mn} = x_{nm}e^{i\theta}$ 不可能成立. 自洽条件 $|x_{nm}|^2 = |x_{mn}|^2$ 只能转化为 $x_{mn} = x^*_{nm}e^{i\theta}$，亦即:

$$a(m, n) = [a(n, m)]^* e^{i\theta}$$

式中 $\theta \in \mathbb{R}$ 是一个待定的实参数.

---

[4]此论断可以看做是对氢原子光谱观测事实的归纳.

- 摒弃玻尔-索莫菲量子化条件，代之以

$$\sum_{\alpha=0}^{+\infty}\left[\omega(n,\ n+\alpha)|a(n,\ n+\alpha)|^2+\omega(n,\ n-\alpha)|a(n,\ n-\alpha)|^2\right]=-\frac{\hbar}{2\mu}$$

此式后来被称为 Heisenberg 量子化条件.

- Bohr 旧量子力学中描写粒子轨道运动的力学量在新量子力学中都要用一个数组替代:

$$\mathscr{O}(n,\ t)\ \rightsquigarrow\ \left\{o(n,\ m)\exp[-i\omega(n,\ m)t]\right\}$$

已经看到 $x(n,\ t)\rightsquigarrow\left\{a(n,\ m)e^{-i\omega(n,\ m)t}\right\}$. 那么，$[x(n,\ t)]^2$ 作为简谐振子势能的核心组件，它自然也是一个有效力学量，在新量子力学中也应替换为一个数组:

$$[x(n,\ t)]^2\ \rightsquigarrow\ \left\{b(n,\ m)\exp[-i\omega(n,\ m)t]\right\}$$

为了保证频率的 Ritz 结合律，Heisenberg 顿悟到 $b(n,\ m)$ 与 $a(n,\ m)$ 之间的关系只能是:

$$b(n,\ m)=\sum_{l=-\infty}^{+\infty}a(n,\ l)a(l,\ m)$$

- 依据

$$b(m,\ n) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} a(m,\ l)a(l,\ n)$$

性质 $a(m,\ n) = \left[a(n,\ m)\right]^* e^{i\theta}$ 意味着:

$$b(m,\ n) = \left[b(n,\ m)\right]^* e^{2i\theta}$$

考虑到不同力学量性质上的一致性, Heisenberg 认识到应该取 θ 使得 $e^{2i\theta} = e^{i\theta}$, 即取 $\theta = 0$ 或者 $\theta = 2n\pi$.[5] 如此, 力学量数组 $b(m,\ n)$ 和 $a(m,\ n)$ 具有类似的性质:

$$b(m,\ n) = \left[b(n,\ m)\right]^*, \quad a(m,\ n) = \left[a(n,\ m)\right]^*$$

- Heisenberg 与导师 Born 交流后, Born 辨认出 Heisenberg 规定的运算实际上是矩阵乘法, Heisenberg 引入的力学量数组实际上是一些厄米矩阵. **Heisenberg 建立的新量子力学因此在历史上曾一度被称为矩阵力学.**

[5] 这里默认 n 为一整数.

事实上，我们以数组 $\{x_{nm}\}$ 的成员 x_{nm} 作为矩阵元可以构造一个矩阵：

$$\boldsymbol{X} = \left[x_{nm} \right]$$

式中

$$x_{nm} = a(n,\ m) \exp[-i\omega(n,\ m)t]$$

显然，

- 矩阵 $\boldsymbol{X}^2$ 的矩阵元构造为：

$$\boldsymbol{X}^2 = \left[\sum_{l=-\infty}^{+\infty} x_{nl} x_{lm} \right], \qquad \rightsquigarrow \quad (\boldsymbol{X}^2)_{nm} = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} x_{nl} x_{lm}$$

- 倘若令 $(\boldsymbol{X}^2)_{nm} = b(n,\ m) \exp[-i\omega(n,\ m)t]$，$\boldsymbol{X}^2$ 的矩阵元又可写为：

$$b(n,\ m) = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} a(n,\ l) a(l,\ m)$$

这正是 Heisenberg 定义的运算规则.

我们看到，玻尔模型中电子的位置坐标 $x(n,\ t)$ 在 Heisenberg 矩阵力学中被替换为一个矩阵

$$\boldsymbol{X} = \left[x_{nm}\right], \qquad x_{nm} = a(n,\ m)\exp[-i\omega(n,\ m)t]$$

- $\boldsymbol{X}$ 是无穷行、无穷列的方阵，矩阵元 x_{nm} 诠释为电子在能级 E_n 与 E_m 之间自发跃迁的概率幅.
- 因为 $\omega(n,\ n) = 0$，电子不能向同一能级跃迁:

  $$a(n,\ n) = 0, \qquad \rightsquigarrow \quad x_{nn} = 0$$

  换言之，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 对角线上的矩阵元俱为零.
- 因为

  $$[a(n,\ m)]^* = a(m,\ n), \quad \omega(n,\ m) = -\omega(m,\ n)$$

  $\boldsymbol{X}$ 的矩阵元具有性质:

  $$[x_{nm}]^* = x_{mn}$$

  换言之，$\boldsymbol{X}$ 是厄米矩阵.

- 值得注意的是，并非只有电子的位置坐标在矩阵力学中要替换为厄米矩阵. 事实上，**经典力学体系中所有的力学量在矩阵力学中均须替换为厄米矩阵.**

考虑跃迁矩阵元 x_{nm} 的时间导数，

$$\dot{x}_{nm} = -ia(n, m)\omega(n, m) \exp[-i\omega(n, m)t] = -\frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)x_{nm}$$

亦即：

$$\dot{x}_{nm} = \frac{1}{i\hbar}\left[\sum_{l=-\infty}^{+\infty} x_{nl}(E_l\delta_{lm}) - \sum_{l=-\infty}^{+\infty}(E_n\delta_{nl})x_{lm}\right] = \frac{1}{i\hbar}\sum_{l=-\infty}^{+\infty}[x_{nl}h_{lm} - h_{nl}x_{lm}]$$

此处约定 $h_{nm} := E_n\delta_{nm}$. 倘若引入厄米矩阵，

$$\boldsymbol{H} = \left[h_{nm}\right]$$

习惯上称之为体系的 Hamilton 矩阵，$\dot{x}_{nm}$ 服从的方程可以表达为矩阵形式：

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \frac{1}{i\hbar}(\boldsymbol{XH} - \boldsymbol{HX})$$

这里，Heisenberg 引入了量子力学中一种极其重要的运算：**矩阵之间的对易子**

$$[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}] = \boldsymbol{AB} - \boldsymbol{BA}$$

籍此可以把上述 Heisenberg 运动方程重新表达为：

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{H}]$$

- 完整的 Heisenberg 运动方程是：

$$\dot{\boldsymbol{X}} = \frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{H}], \qquad \dot{\boldsymbol{P}} = \frac{1}{i\hbar}[\boldsymbol{P},\ \boldsymbol{H}]$$

此处 $\boldsymbol{P}$ 是电子的动量在矩阵力学中对应的厄米矩阵：

$$\boldsymbol{P} = \mu\dot{\boldsymbol{X}} = \left[p_{nm}\right],$$

对于保守力体系，

$$\boldsymbol{H} = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2\mu} + V(\boldsymbol{X})$$

- Heisenberg 假设牛顿第二定律替换为矩阵形式后在量子力学中仍成立，

  $$\dot{\boldsymbol{P}} = -\frac{\partial V(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}$$

  因此，必须有：

  $$[\boldsymbol{P},\ \boldsymbol{H}] = -i\hbar\frac{\partial V(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}$$

  换言之，

  $$[\boldsymbol{P},\ V(\boldsymbol{X})] = -i\hbar\frac{\partial V(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}$$

  试问此式的成立意味着什么？ 特别地，厄米矩阵 $\boldsymbol{X}$ 与 $\boldsymbol{P}$ 是否对易？

构造 $\boldsymbol{X}$ 与 $\boldsymbol{P}$ 的对易子，

$$\boldsymbol{\Omega} := [\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{P}]$$

我们看到：

$$\dot{\boldsymbol{\Omega}} = [\dot{\boldsymbol{X}},\ \boldsymbol{P}] + [\boldsymbol{X},\ \dot{\boldsymbol{P}}] = \left[\frac{1}{\mu}\boldsymbol{P},\ \boldsymbol{P}\right] - \left[\boldsymbol{X},\ \frac{\partial V(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}}\right] = 0$$

即 $\boldsymbol{\Omega}$ 是一个与时间无关的常数矩阵.

事实上, 倘若注意到位置坐标矩阵与动量矩阵的矩阵元分别是 x_{nm} 和 $p_{nm} = \mu \dot{x}_{nm}$, 且

$$x_{nm} = a(n,\ m)\,\mathrm{exp}[-i\omega(n,\ m)t]$$

以及

$$\dot{x}_{nm} = -i\omega(n,\ m)a(n,\ m)\,\mathrm{exp}[-i\omega(n,\ m)t] = -i\omega(n,\ m)x_{nm}$$

我们有 $p_{nm} = -i\mu x_{nm}\omega(n, m)$, 且:

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Omega}_{nm} &= (\boldsymbol{XP} - \boldsymbol{PX})_{nm} \\
&= \sum_{l=-\infty}^{+\infty} [x_{nl}p_{lm} - p_{nl}x_{lm}] \\
&= -i\mu \sum_{l=-\infty}^{+\infty} [x_{nl}x_{lm}\omega(l,\ m) - x_{nl}x_{lm}\omega(n,\ l)] \\
&= -i\mu \sum_{l=-\infty}^{+\infty} x_{nl}x_{lm}[\omega(l,\ m) - \omega(n,\ l)]
\end{aligned}$$

$\mathbf{\Omega}$ 的对角矩阵元为:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{\Omega}_{nn} &= -i\mu \sum_{l=-\infty}^{+\infty} x_{nl}x_{ln}\left[\omega(l,\ n)-\omega(n,\ l)\right] \\
&= 2i\mu \sum_{l=-\infty}^{+\infty} |x_{nl}|^2\omega(n,\ l) \\
&= 2i\mu \sum_{l=-\infty}^{+\infty} |a(n,\ l)|^2\omega(n,\ l) \\
&= 2i\mu \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} |a(n,\ n+\alpha)|^2\omega(n,\ n+\alpha) \\
&= 2i\mu \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \left[|a(n,\ n+\alpha)|^2\omega(n,\ n+\alpha)+|a(n,\ n-\alpha)|^2\omega(n,\ n-\alpha)\right]
\end{aligned}
$$

最后一步使用了 $\omega(n,\ n)=0$ 的实验事实. 进一步使用 Heisenberg 量子化条件, 可知:

$$\mathbf{\Omega}_{nn} = -i\hbar$$

$\boldsymbol{\Omega}$ 的非对角矩阵元均为零. 理由如下. 通过求 $\boldsymbol{\Omega}_{nm}$ 的时间导数可知:

$$\begin{aligned}
0 &= \dot{\boldsymbol{\Omega}}_{nm} \\
&= -i\mu \sum_{l=-\infty}^{+\infty} (\dot{x}_{nl}x_{lm} + x_{nl}\dot{x}_{lm}) \left[\omega(l,\ m) - \omega(n,\ l)\right] \\
&= -\mu \sum_{l=-\infty}^{+\infty} x_{nl}x_{lm} \left[\omega(n,\ l) + \omega(l,\ m)\right] \left[\omega(l,\ m) - \omega(n,\ l)\right] \\
&= -\mu\omega(n,\ m) \sum_{l=-\infty}^{+\infty} x_{nl}x_{lm} \left[\omega(l,\ m) - \omega(n,\ l)\right] \\
&= -i\omega(n,\ m)\boldsymbol{\Omega}_{nm}
\end{aligned}$$

对于非对角矩阵元 $\boldsymbol{\Omega}_{nm}$ 而言, $n \neq m$, 我们有 $\omega(n,\ m) \neq 0$. 所以,

$$\boldsymbol{\Omega}_{nm} = 0, \quad (n \neq m)$$

综合起来, 即有:

$$\boldsymbol{\Omega}_{nm} = -i\hbar\delta_{nm}$$

亦即：

$$[\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{P}] = -i\hbar\boldsymbol{I}$$

此式称为量子力学基本对易关系[6]，它是 Heisenberg 测不准原理的理论基础．据此对易关系不难推论：

$$\Delta X \Delta P \sim \hbar$$

所以，量子力学体系的运动不是沿着确定轨道的机械运动．

[6]按照目前流行的习惯，量子力学基本对易关系表达为：

$$[\boldsymbol{X},\ \boldsymbol{P}] = i\hbar\boldsymbol{I}$$

此式虽与正文中所述量子力学基本对易关系的数学表达略有差异，但这一差异不会造成物理结果上的不同．

量子力学历史上的若干重要事件：

1. Heisenberg 矩阵力学建立后，Pauli 立刻将其用于氢原子并成功地求出了玻尔能级公式. 物理学界开始接受矩阵力学.
2. 好事成双. 1926 年，Schrödinger 在德布罗意物质波假设的基础上建立了波动力学，
$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\hat{H}\psi$$
也成功地求出了氢原子的玻尔能级公式.
3. 人们很快认识到：矩阵力学与波动力学事实上是等价的. 它们其实是量子力学理论的既不同、又等价的表达方式.
4. 1927 年，Born 提出了量子力学的概率诠释. 至此，量子力学的理论框架基本上建立起来了.
5. 1964 年以来，随着 Bell 不等式的提出与对量子纠缠现象研究的深入，爆发了量子力学的第二次革命.

附录：海森堡量子化条件的“推导”

海森堡量子化条件来源于玻尔-索莫菲量子化条件. 后者在本讲义正文中已经表达为：

$$h = 2\pi\mu \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \alpha \frac{d}{dn}\left[\alpha\omega(n)\left|a(n,\ \alpha)\right|^2\right]$$

回忆微商的定义式

$$\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = \lim_{a\to 0}\left[\frac{f(x+a)-f(x)}{a}\right]$$

并注意到参数 α 离散化取值，玻尔-索莫菲量子化条件中对量子数 n 的微商实际上应按差分理解：

$$h = 2\pi\mu \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty}\left[\alpha\omega(n+\alpha)\left|a(n+\alpha,\ \alpha)\right|^2 - \alpha\omega(n)\left|a(n,\ \alpha)\right|^2\right]$$

过渡到矩阵力学需要在上式中做代换：

$$a(n,\alpha) \rightsquigarrow a(n,n-\alpha), \qquad \alpha\omega(n) \rightsquigarrow \omega(n,n-\alpha) = \omega(n-\alpha)-\omega(n)$$

如此,玻尔-索莫菲量子化条件就演变成了海森堡量子化条件:

$$h = 2\pi\mu \sum_{\alpha=-\infty}^{+\infty} \left[\omega(n+\alpha, n)\,|a(n+\alpha,\ n)|^2 - \omega(n, n-\alpha)\,|a(n,\ n-\alpha)|^2\right]$$

再注意到 $\omega(n,\ n) = 0$, $\omega(m,\ n) = -\omega(n,\ m)$ 以及跃迁振幅服从的性质 $|a(m,\ n)| = |a(n,\ m)|$, 我们最终可以把海森堡量子化条件表达为:

$$h = -4\pi\mu \sum_{\alpha=0}^{+\infty} \left[\omega(n,\ n+\alpha)\,|a(n,\ n+\alpha)|^2 + \omega(n, n-\alpha)\,|a(n,\ n-\alpha)|^2\right]$$

即:

$$\sum_{\alpha=0}^{+\infty} \left[\omega(n,\ n+\alpha)\,|a(n,\ n+\alpha)|^2 + \omega(n, n-\alpha)\,|a(n,\ n-\alpha)|^2\right] = -\frac{\hbar}{2\mu}$$

这正是期待的结论.