

“纪念量子力学诞生一百周年”系列：经典再现与评述

一百年前的1924年6月13日，德国哥廷恩大学的玻恩(Max Born, 1882—1970)提交了一篇题为“Über Quantenmechanik”的论文，世界上从此有了“量子力学”一词。正如1824年卡诺的“Réflexions sur la puissance motrice du feu et sur les machines propres à développer cette puissance (关于火的驱动能力以及发挥此一能力之适当机械的思考)”一文一出才算有了热力学，此前只是关于热现象与热机械的探索，在玻恩1924年论文之前以普朗克1900年的光能量量子假说为标志的物理理论，是量子理论(Quantentheorie)而非量子力学。实际上，更早的把能量予以量子化的做法见于玻尔兹曼1872年和1877年关于热的力学理论的论文。量子力学诞生至今100年，世界各国介绍和研究量子力学的努力与水平各有不同。容笔者斗胆胡言，对于科学后发地区而言，所谓的量子力学不易理解，不过是对经典力学毫不知情的别样表达。笔者当年在大三时第一次上量子力学课，可以说就是在对经典物理毫不了解的情况下接触到量子力学的。多年后有幸读到那些量子力学创立者的著作原文，虽然依然不懂量子力学，但笔者好在明白了是因为自己不懂经典物理(还有数学、科学方法等)的缘故。有感于笔者本人学习量子力学的艰

难曲折，值此量子力学诞生一百周年之际，笔者将选译几篇量子力学创立时期的奠基性论文，比如玻恩、约当、海森堡、薛定谔、泡利、狄拉克等人的，给予翻译介绍，偶尔也会不揣冒昧撰写一两篇关于人物与事件的评述文章，一来向创立量子力学的先辈学者致敬，二来试图展现物理学发展的连续性(从没有什么量子力学与经典力学的割裂)，三来也是想提供原始文献供我国学者澄清一些关于量子力学的误解。有同仁愿意供稿襄助，先谢为敬。

——中国科学院物理研究所 曹则贤

Über Quantenmechanik.

Von M. Born in Göttingen.

(Eingegangen am 13. Juni 1924.)

Die Arbeit enthält einen Versuch, den ersten Schritt zur Quantenmechanik der Kopplung aufzustellen, welcher von den wichtigsten Eigenschaften der Atome (Stabilität, Resonanz für die Sprungfrequenzen, Korrespondenzprinzip) Rechenschaft gibt und in natürlicher Weise aus den klassischen Gesetzen entsteht. Diese Theorie enthält die Dispersionsformel von Kramers und zeigt eine enge Verwandtschaft zu Heisenbergs Formulierung der Regeln des anomalen Zeemaneffekts.

玻恩创立量子力学的论文(Max Born. Über Quantenmechanik. Zeitschrift für Physik, 1924, 26: 379—395), 收稿日期为1924年6月13日

论量子力学

Max Born 著 曹则贤[†] 译

2024-01-31收到 [†] email: zxcao@iphy.ac.cn DOI: 10.7693/wl20240204

本文尝试迈出朝向耦合之量子力学的第一步，其可从原子的重要性质(稳定性、跃迁频率的共振，以及对应原理)得到辩护，并自然地经典规律中生发。此一理论包含克拉默斯的色散公式，并展现出同反常塞曼效应规则的海森堡表述之间的密切关系。

1 引言

在所有涉及多电子运动的情形中(比如在氦那里)，量子理论失效的问题被一再归咎于在相应的情形中每一个电子上都作用着一个其频率与光波

处于同一量级的交换场。如今人们深知原子对光波完全是“非力学”响应的(即会被激发出量子跃迁)，因此也就不能指望原子中的电子之间的相互作用遵循经典力学的规律；将用量子规则补充了的经典扰动理论应用于稳态轨道计算也会失效。

只要尚未能认识光影响原子的规律，以及色散与原子结构、量子跃迁之间的关系，则人们关于原子中多电子之间的相互作用之规则就总是稀里糊涂的。

最近，恰是在辐射与原子结构之间关系这个领域，玻尔、克拉默斯和斯拉特¹⁾等人取得了实质性的进展。在我看来，这首先在于再次在极高的程度上摆正了经典光学的位置。此一思想的成果也体现在如下事实，克拉默斯成功地得到了色散公式，并证明其满足量子理论的所有要求，特别是对应原理的要求²⁾。

针对此事可作如是想，由克拉默斯如此成功地应用于光场和被照射电子之间相互作用的思考难道不可以相应地推广到原子中的多电子间相互作用吗？对克拉默斯色散公式的审视启发我们在扰动力学系统的一般性质中去找寻他所采用过的量子化(Quantisierung)。本文中的工作就是践行这个想法的尝试³⁾。

我们试着将关于对力学体系由加入内部耦合或者外场所引起之扰动的经典规律表述成与从经典力学到“量子力学”的形式过渡非常接近的那样的确定形式。如此量子规则将以本质上不变的面目得到保留，未扰动系统(假设其是可分离变量的、非退化的)的作用积分以作用量子 h 的倍数出现⁴⁾。与此相对，力学则有所改变，即在由玻尔频率条件所展示的意义上从微分方程过渡到差分方程。在非退化体系的简单情形中，由此引起任意性的可能性可以排除。

此一“量子力学”与老量子规则的结合方向的相互作用规律，其首先应该经受如下检验，即是否包含克拉默斯的色散公式。结果确实如此，且由此也赢得用于其他研究之基础。

首先应思考海森堡所构造的反常塞曼效应的理论形式，其与我们的几条预设之间的关系跃然而出。当然不能指望此处所讨论的通向耦合系统

之量子力学的初步(结果)就包括海森堡的量子步骤，因为多重态和塞曼效应的特征是纠缠的退化{见译后注}。暂且为多重态公式构造一个准经典的替代模型，此(多重态)公式与此处为最简单情形所建立的量子力学规则之间的形式类比清晰地表明，量子规则触及了耦合过程的实质。

我们的建立耦合之量子力学的尝试有许多优点，那恰是展现原子性质如稳定性、跃迁频率的共振以及满足对应原理等等所需要的。其(正确性)是否确实有保证，可以由简单系统的定量计算来验证。为此，一些源于退化之多种可能性的相当大的困难还要克服。

2 置于外力之下系统的经典扰动理论

考察一力学系统，其运动方程可以通过分离变量求解； ω_k^0, J_k^0 ($k=1, \dots, f$) {原文误为 $k=1, \dots, \omega_f$ } 是所属的角-作用量变量，

$$H_0(\omega_1^0, \omega_2^0, \dots, \omega_f^0, J_1^0, J_2^0, \dots, J_f^0) \quad (1)$$

是哈密顿函数。首先我们假设不存在(本征的)退化，也即频率

$$v_k = \frac{\partial H_0}{\partial J_k^0} \quad (2)$$

全不为零。

现在考察扰动的功效，该扰动既可能以(先前的可忽略的)内部耦合也可能以周期性外部作用的形式出现。

对于第一种情形，扰动函数可以展开为傅里叶级数

$$\sum_{\tau_1, \dots, \tau_f} C_{\tau_1, \dots, \tau_f} e^{2\pi i(\omega_1^0 \tau_1 + \dots + \omega_f^0 \tau_f)} \quad (3)$$

而外部作用有频率 ν_0 ，由傅里叶级数

$$\sum_{\tau_0} C_{\tau_0} e^{2\pi i \omega_0^0 \tau_0} \quad (4)$$

表示，其中

$$\omega_0^0 = \nu_0 t \quad (5)$$

我们假设 C_{τ_0} 自身是 $\omega_1^0, \dots, \omega_f^0$ 的周期函数，允许式(3)那样的展开。进一步地，我们还假设 ν_0 不与系统的任何本征频率 ν_1, \dots, ν_f 相公度，即对任何的整数系统 $\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_f$ ，有

$$(\tau \nu) = \tau_0 \nu_0 + \tau_1 \nu_1 + \dots + \tau_f \nu_f \neq 0 \quad (5a)$$

1) N. Bohr, H. A. Kramers, J. C. Slater, ZS. f. Phys. 24, 69, 1924.

2) H. A. Kramers, Nature 113, 673, Nr. 2845, 10. Mai 1924.

3) 一个偶然的机会让我和玻尔先生谈论过本文的内容，这对概念的澄清极有帮助。此外，对海森堡先生的诸多建议和计算上的帮助，我由衷感激。

4) 对于受扰动的系统，其解为纠缠的，一般来说不是倍周期的，无须定义作用积分。

我们拟考察的一般的哈密顿函数有形式

$$H = H_0 + \lambda H_1, \quad (6)$$

其中

$$H_1 = \sum_{\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_f} C_{\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_f} e^{2\pi i(\omega_0^0 \tau_0 + \omega_1^0 \tau_1 + \dots + \omega_f^0 \tau_f)}. \quad (7)$$

我们在这里引入了简记

$$H_1 = \sum_{\tau} C_{\tau} e^{2\pi i(\omega^0 \tau)} \quad (\tau = \tau_0, \tau_1, \dots, \tau_f), \quad (7a)$$

此处 $C_{\tau} = C_{\tau_0, \tau_1, \dots, \tau_f}$ 是 J_1, \dots, J_f 的函数；为让 H_1 是实的，故其必须满足条件

$$C_{-\tau_0, \dots, -\tau_f} = \tilde{C}_{\tau_0, \dots, \tau_f}, \text{ 或简写为 } C_{-\tau} = \tilde{C}_{\tau}, \quad (7b)$$

这里符号 \sim 的意思是复共轭。

缺少外场的情形可作为一般的设定 $v_0 = 0$ 出现，可以简单地忽略各处的指标 0 即可。

函数 H 因为式(5)而显含时间。不过，正则方程仍成立

$$\dot{\omega}_k^0 = \frac{\partial H}{\partial J_k^0}; \quad J_k^0 = -\frac{\partial H}{\partial \omega_k^0}. \quad (8)$$

为了求解，我们找寻新的变量 $\omega_k, J_k (k = 1, \dots, f)$ ，利用母函数 $S(\omega_0^0, \omega_1^0, \dots, \omega_f^0; J_1, \dots, J_k)$ 所构造的正则替换

$$J_k^0 = \frac{\partial S}{\partial \omega_k^0}; \quad \omega_k = \frac{\partial S}{\partial J_k}; \quad H + \frac{\partial S}{\partial t} = W \quad (k = 1, \dots, f), \quad (9)$$

要如此引入，使得 W 只依赖于 J_k ⁵⁾。则有变换后的运动方程

$$\dot{\omega}_k = \frac{\partial W}{\partial J_k}; \quad \dot{J}_k = -\frac{\partial S}{\partial \omega_k} = 0, \quad (10)$$

故 J_k 是不变量，而 ω_k 是时间的线性函数。

除了对于 $v_0 = 0$ 的情形， W 都不是系统的能量，因为在有随时间变化的外场的情形下它不是常数；我们将看到，它是外场下系统的平均能量（包括同外场的交换作用能）。

我们预设 S 为幂级数形式

$$S = \sum_{k=1}^f \omega_k^0 J_k + \lambda S_1 + \lambda^2 S_2 + \dots, \quad (11)$$

将之代入方程

$$H + v_0 \frac{\partial S}{\partial \omega_0^0} = W_0 + \lambda W_1 + \lambda^2 W_2 + \dots, \quad (12)$$

其中 W_0 (微扰动系统的能量)， W_1, W_2, \dots 只应是

5) 因为 H 显含 t ，故必须也设定一个依赖于 t ，也即 ω_0^0 ，的函数 S ，并引入新的哈密顿函数 W 代替 H 。

J_k 的函数。接下来，可得近似方程

$$\sum_{k=0}^f v_k \frac{\partial S_1}{\partial \omega_k^0} + H_1 = W_1, \quad (13a)$$

$$\sum_{k=0}^f v_k \frac{\partial S_2}{\partial \omega_k^0} + \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^f \frac{\partial^2 H_0}{\partial J_k \partial J_l} \frac{\partial S_1}{\partial \omega_k^0} \frac{\partial S_1}{\partial \omega_l^0} + \sum_{k=1}^f \frac{\partial H_1}{\partial J_k} \frac{\partial S_1}{\partial \omega_k^0} = W_2, \quad (13b)$$

.....

这些方程的解可由现成的方法得到。首先对所有的 $\omega_k^0 (k = 0, 1, \dots, f)$ 求(13a)的平均，得

$$\overline{H_1} = C_{0,0,\dots,0} = C_0 = W_1, \quad (14)$$

积分(13a)，得

$$S_1 = -\frac{1}{2\pi i} \sum_{\tau}' \frac{C_{\tau}}{(v\tau)} e^{2\pi i(\omega\tau)}, \quad (15)$$

其中求和符号上的撇号意思是剔除 $\tau_0 = 0, \tau_1 = 0, \dots, \tau_f = 0$ 项。现在将式(13b)改写成

$$\sum_k v_k \frac{\partial S_2}{\partial \omega_k^0} + \frac{1}{2} \sum_{kl} \frac{\partial v_l}{\partial J_k} \sum_{\tau}' \sum_{\tau'} \frac{\tau_k \tau_l' C_{\tau} C_{\tau'}}{(v\tau)(v\tau')} e^{2\pi i(\omega^0, \tau + \tau')} + \sum_k \sum_{\tau} \sum_{\tau'} \frac{\partial C_{\tau}}{\partial J_k} \frac{\tau_k' C_{\tau'}}{(v\tau')} e^{2\pi i(\omega^0, \tau + \tau')} = W_2.$$

求平均，得

$$\frac{1}{2} \sum_{kl} \frac{\partial v_l}{\partial J_k} \sum_{\tau}' \tau_k \tau_l' \frac{C_{\tau} C_{-\tau}}{(v\tau)^2} - \sum_k \sum_{\tau}' \frac{\partial C_{\tau}}{\partial J_k} \frac{\tau_k C_{-\tau}}{(v\tau)} = W_2.$$

可以写成

$$W_2 = -\frac{1}{2} \sum_{\tau}' \sum_k \tau_k \frac{\partial}{\partial J_k} \left[\frac{|C_{\tau}|^2}{(v\tau)} \right], \quad (16)$$

或者考虑到(5a)，写成

$$W_2 = - \sum_{(v\tau) > 0} \sum_k \tau_k \frac{\partial}{\partial J_k} \left[\frac{|C_{\tau}|^2}{(v\tau)} \right]. \quad (16a)$$

我们对此一近似结果感到满意。

公式(14)、(16)分别表示内部耦合和外力的影响。若只有前者在，如前所述，可简单地令 $v_0 = 0$ ，即可得到扰动理论的公式。关键的是，当有周期性外场时，此公式除了在 $(v\tau)$ 中加入 $v_0 \tau_0$ 以外是不变的。

3 经典色散理论

作为例子，我们考察单色、线偏振的光波对未扰动系统的影响。电矢量平行于 x -轴振动：

$$\varepsilon_x = E \cos 2\pi\nu_0 t = \frac{1}{2} E (e^{2\pi i \omega_0^0} + e^{-2\pi i \omega_0^0}) . \quad (17)$$

对系统做功为 $p^0 E = p_x^0 \varepsilon_x$, 其中 p^0 是(未扰动)系统的电极矩. p_x^0 有如下展开形式

$$p_x^0 = \sum_{\tau} A_{\tau} e^{2\pi i (\omega^0 \tau)} , \quad (\tau = \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_f) , \quad (18)$$

且必有关系

$$A_{-\tau} = \tilde{A}_{\tau} . \quad (18a)$$

由此得扰动函数

$$H_1 = p_x^0 \varepsilon_x = \frac{1}{2} E \sum_{\tau} \left(A_{\tau} e^{2\pi i [(\omega_0 \tau) + \omega_0^0]} + A_{-\tau} e^{-2\pi i [(\omega_0 \tau) - \omega_0^0]} \right) \quad (\tau = \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_f) . \quad (19)$$

{原文此处为 ω_0 }

对照公式(7a) ($\lambda = 1$), 有

$$\begin{cases} C_{1, \tau_1, \dots, \tau_f} = \frac{1}{2} E A_{\tau_1, \dots, \tau_f} = \frac{1}{2} E A_{\tau} , \\ C_{-1, -\tau_1, \dots, -\tau_f} = \frac{1}{2} E A_{-\tau_1, \dots, -\tau_f} = \frac{1}{2} E A_{-\tau} . \end{cases} \quad (19a)$$

对于 $\tau_0 \neq \pm 1$, C_{τ} 为零 {此处(19a)中的 τ_f 原文少了负号}.

由式(14)和式(16), 可得

$$\begin{cases} W_1 = 0 , \\ W_2 = -\frac{E^2}{4} \frac{1}{2} \sum_{\tau} \sum_k \tau_k \frac{\partial}{\partial J_k} \left(\frac{|A_{\tau}|^2}{(\nu\tau) + \nu_0} + \frac{|A_{-\tau}|^2}{(\nu\tau) - \nu_0} \right) . \end{cases} \quad (20)$$

第二个表达式可改写为

$$W_2 = -\frac{E^2}{4} \sum_{(\nu\tau) > 0} \sum_k \tau_k \frac{\partial}{\partial J_k} \left[\frac{2|A_{\tau}|^2 (\nu\tau)}{(\nu\tau)^2 - \nu_0^2} \right] \quad (\tau = \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_f) . \quad (21)$$

{原文 $(\nu\tau)^2$ 项有错, 已更正}

为了评价光场对系统运动的影响, 我们来计算其对电极矩的作用.

在式(18)中根据式(9)代入

$$\omega_k^0 = \omega_k - \lambda \frac{\partial S_1}{\partial J_k} , \quad J_k^0 = J_k + \lambda \frac{\partial S_1}{\partial \omega_k^0} ,$$

则有

$$p_x = p_x^0 + \lambda p_x^{(1)} , \quad (22)$$

其中

$$p_x^{(1)} = \sum_k \left(\frac{\partial p_x^0}{\partial J_k^0} \frac{\partial S_1}{\partial \omega_k^0} - \frac{\partial p_x^0}{\partial \omega_k^0} \frac{\partial S_1}{\partial J_k^0} \right) . \quad (22a)$$

{最后一项分母中原文为 J_k }

由式(15)和式(19a)得到

$$S_1 = -\frac{1}{2} E \frac{1}{2\pi i} \times \sum_{\tau} \left(\frac{A_{\tau}}{(\nu\tau) + \nu_0} e^{2\pi i [(\omega_0 \tau) + \omega_0^0]} - \frac{A_{-\tau}}{(\nu\tau) - \nu_0} e^{-2\pi i [(\omega_0 \tau) + \omega_0^0]} \right) . \quad (23)$$

将式(18)和式(23)代入式(22), 经过简单计算可得

$$p_x^{(1)} = -E \cos (2\pi\nu_0 t) \sum_k \sum_{(\nu\tau) > 0} \tau_k \frac{\partial}{\partial J_k} \left[\frac{2|A_{\tau}|^2 (\nu\tau)}{(\nu\tau)^2 - \nu_0^2} \right] , \quad (24)$$

进而得到平均

$$\overline{\frac{1}{2} p_x^{(1)} \varepsilon_x} = W_2 . \quad (25)$$

由此看出 W_2 与光场中系统之平均能量之间的关系. 公式(25)中的因子 1/2 需要解释一下. 作为极化系统最简单模型我们考察一个准弹性能为 $\frac{a}{2} x^2$ 的振子, 电场 E 作用于其上; 在场中的总能量为

$$W = \frac{a}{2} x^2 + Ex .$$

平衡条件为

$$x_0 = -\frac{E}{a} ,$$

平衡时的能量为 $W_0 = -\frac{1}{2a} E^2 = \frac{1}{2} x_0 E$. 容易看出, 式(25)中的因子 1/2 恰如此处所见, 是由产生失配对外场之部分做功的补偿引起的.

式(21)与式(24), 就对光频率 ν_0 的依赖而言, 有共振公式的典型形态, 如同在经典色散理论中总出现的那样; 共振点是本征频率以及所有的倍频⁶⁾.

4 向量子理论过渡

现在尝试实现从经典公式向量子理论的过渡. 为此, 我们要利用玻尔、克拉默斯和斯拉特

6) P. Epstein 曾用不同的方式借助扰动计算处理过色散理论(ZS. f. Phys. 9, 92, 1922).

等人在所引述的工作中引入的为量子跃迁赋予频率的直观表达；我们的思路与这一理论的决定性的也是充满争议的概念构造，如能量与动量转移的概率描述，无关。

根据玻尔(的观点)，每一个稳态都携带一串“虚的”振子，其向其它稳态过渡的频率对应如下的频率条件

$$h\nu = |W_1 - W_2| ,$$

检视从某一特定的稳态

$$n_1, n_2, \dots, n_i \dots n_f$$

发起的量子跃迁，可根据终态能量的或低或高拆分为两类。其一，数目有限的，同光的发射相联系；对应的是诸多状态 n_i 的频率为 $\nu(n, n') = \frac{1}{h} [W(n) - W(n')]$ 的“发射振子”。

第二类跃迁，一般来说数目是无限多的，在光吸收时发生；对应的是状态为 n_i 的频率为 $\nu(n', n) = \frac{1}{h} [W(n') - W(n)]$ 的“吸收振子”。

对应每一个“虚振子”(过渡){即跃迁}是稳态 n_i 的一个倍频，针对力学替代模型可根据经典规则计算得到。其频率为 $(\nu\tau)$ ，其中 $\tau_i = |n_i - n'_i|$ ，而频率 ν_i 依赖于所考察稳态的量子数 n_i 。

在经典频率 $(\nu\tau)$ 与量子论的吸收频率 $\nu(n', n)$ 之间存在如下定量关系。设想过渡 $n_k \rightarrow n_{k'} = n_k + \tau_k$ 是“直线”进行的，即作用量积分取为

$$J_k = h(n_k + \mu\tau_k) , \quad 0 \leq \mu \leq 1 . \quad (26)$$

则一方面有

$$\begin{aligned} (\nu\tau) &= \sum_k \nu_k \tau_k = \sum_k \frac{\partial H_0}{\partial J_k} \tau_k = \frac{1}{h} \sum_k \frac{\partial H_0}{\partial J_k} \frac{dJ_k}{d\mu} \\ &= \frac{1}{h} \frac{dH_0}{d\mu} , \end{aligned} \quad (27)$$

另一方面

$$\nu(n', n) = \frac{1}{h} [H_0(n + \tau) - H_0(n)] , \quad (28)$$

因此

$$\nu(n + \tau, n) = \int_0^1 (\nu\tau) d\mu . \quad (29)$$

振子的真实的(量子论的)频率是对应的(经典的)频率的“直线”平均值。换种说法， $\nu(n + \tau, n)$ 和 $(\nu\tau)$ 自 H_0 的构造规则{在两种语境中

}表现如同微分商相对于差分商。

现在考察耦合过程，其在替代模型中是用扰动函数 λH_1 表示的。基于此将虚振子当作实在的、本原的，是在经典计算方法中用于真实的量子规则之理性探知的辅助工具，由此获得如下见解：

耦合表现为虚振子间的相互影响(辐射)。为了找到此一影响的规则，人们考察关于模型运动的倍频的对应规则。为此要找寻扰动能的表示，其中能量以倍频分量之和的形式出现。

我们的基本公式(16a)正好可实现该目标。公式如频率 $(\nu\tau)$ 有同样的形式，根据式(27)可表示为

$$\sum_k \tau_k \frac{\partial}{\partial J_k} = \frac{1}{h} \frac{d}{d\mu} .$$

这样，人们不得不面对这样的要求，在经典计算的量有形式 $\sum_k \tau_k \frac{\partial \Phi}{\partial J_k} = \frac{1}{h} \frac{d\Phi}{d\mu}$ 时{求和指标应为 k 。

原文如此}，将之用直线平均值或者差分替代，即

$$\int_0^1 \sum_k \tau_k \frac{\partial \Phi}{\partial J_k} d\mu = \frac{1}{h} [\Phi(n + \tau) - \Phi(n)] . \quad (30)$$

在基本公式(16a)中，除了这种构造之外，还出现了量 $|C_\tau|^2 = C_\tau C_{-\tau}$ ，其为经典替代模型的倍频的振动能量的量度。自然地，也要将其通过虚振子的“对应的”量代替。这样看来，为傅里叶系数 C_τ 本身(C_0 是例外，它就不对应虚振子，在量子公式中未加改动就代入了)寻找对应量就没意义了。显然，只有二次型 $|C_\tau|^2 = C_\tau C_{-\tau}$ 才有量子理论的意义。我们将其对应的量用 $\Gamma(n', n)$ 命名。因为 $|C_\tau|^2$ 不随 τ 的符号改变而改变，可假设 $\Gamma(n', n)$ 是对称的

$$\Gamma(n', n) = \Gamma(n, n') . \quad (31)$$

如何确定 Γ 的问题，同谱线强度关系的问题密切相关，对量子理论的进一步发展具有重要意义。欲处理外场的效应，当外场中的运动具有条件周期性、可通过分离变量计算时显然可确定 Γ ，因为 $W_2^{(qu)}$ 的值也可用关于条件周期系统的已确立的理论而获得。对于两个系统之间耦合的情形，系统整体的经典 C_τ - 值可由各分系统在外场下的相应的值导出；为此应该假设，相应的结论对量子理论的 Γ - 值也成立。现在，将(16a)中出现的量

$$\frac{|C_\tau|^2}{(v\tau)} \text{用} \frac{\Gamma(n+\tau, n)}{v(n+\tau, n)} \text{代替,} \quad (32)$$

且将其中出现的“直线的”微分代之以差分商

$$\begin{aligned} W_2^{(qu)} &= -\sum_{\tau_k > 0} \int_0^1 \sum_k \tau_k \frac{\partial}{\partial J_k} \left(\frac{\Gamma}{v} \right) d\mu \\ &= -\frac{1}{h} \sum_{\tau_k > 0} \left(\frac{\Gamma(n+\tau, n)}{v(n+\tau, n)} - \frac{\Gamma(n, n-\tau)}{v(n, n-\tau)} \right). \end{aligned} \quad (33)$$

对 τ_k 的求和包含了所有从状态 n_k 发起的量子跃迁, 即在第一项中的吸收跃迁, 第二项中的发射跃迁。耦合被分解为发射和吸收振子的作用, 以相反的符号现身其中。

公式(33)的重要性质罗列如下: 首先, 对于(相对于 τ_k)大的 n_k , 其会过渡到相应的经典公式, 即满足对应原理。其二, 量子理论的频率 $v(n, n')$ 出现在分母中的经典的 $(v\tau)$ 上。最后一点, 有著名的性质, 向高倍频的跃迁总是落到这样的 $(\tau = \tau_1, \tau_2, \dots, \tau_f)$ 上, $(v\tau) = v_0\tau_0 + \dots + v_f\tau_f$ 非常小; 对应这些“小分母”的级数项则贡献了特别大的部分(故此对如下现象负责, 经典扰动级数在 J_1, \dots, J_f 所张的空间中处处为稠的点是发散的)。直观地, 可以这样阐释, 系统对所有倍频振动的稠分布频率可共振。在量子理论公式中, 在倍频位置上出现的是频率满足完全不同的分布律的量子跃迁; 在从一个非常有限的 n_k 的稳态发起的可能跃迁中, 有一个最小的(量子论的)频率。由此, 量子理论的级数(式33)的收敛性不会象对应的经典级数那样构成特别困难的问题。

关于一阶扰动能(14)式

$$\overline{H}_1 = W_1 = C_0$$

要说明一下。其只出现在外场扰动的场合, 在内部耦合的情形中不出现。应该假设, 对 C_0 无须采取进一步的量子化过程。这一(量子化)程式目前对所有情形都成立。

5 克拉默斯的色散理论

克拉默斯最近在 *Nature* 上发表的色散公式(见前)此处利用同样的量子化过程, 此过程已就

7) R. Ladenburg, ZS. f. Phys. 4, 451, 1921. 另参考 R. Ladenburg, F. Reiche, Die Naturwissenschaften 11, 584, 1923.

扰动能量详细解释过, 由§2中的公式(24)给出。我们得到光场在处于稳态 n_k 的振子上产生的电极矩为

$$p_x^{(1)} = E \cos(2\pi\nu_0 t) \frac{1}{h} \sum \left[\frac{2\Gamma_a v_a}{v_a^2 - \nu_0^2} - \frac{2\Gamma_e v_e}{v_e^2 - \nu_0^2} \right], \quad (34)$$

其中为简洁计引入了

$$\begin{cases} v_a = v(n+\tau, n), v_e = v(n, n-\tau) \\ \Gamma_a = \Gamma(n+\tau, n), \Gamma_e = \Gamma(n, n-\tau) \end{cases} \quad (35)$$

求和是关于所有吸收振子(a)和所有发射振子(e)的。

这里吸收频率和发射频率以共振点的面目出现。但是, 两类振子的行为是不同的: 只有吸收振子对经典振子有正的贡献, 而发射振子的贡献是负的。这一项的加入让克拉默斯的色散公式不同于旧的拉登伯格的预设⁷⁾; 恰是通过这个差的构造, 公式在大的量子数(n_k 大于 τ_k)的极限处过渡到了对应的经典公式, 而这正是对应原理所要求的。

克拉默斯从拉登伯格处借用了量 Γ 同从稳态 n'_k 到低能量稳态 n_k 的自发过程的爱因斯坦概率 a''_n 之间的关系。关于这一点我们不深入讨论。

6 退化与久期扰动

利用我们的公式(33), 对所有非退化体系扰动的直到 λ 的二阶项的计算可归于如何确定对应经典 $|C_\tau|^2$ 的量子理论的量 $\Gamma(n, n')$ 。公式的实操所要面对的困难是, 关于 $\Gamma(n, n')$ 我们没有可靠的知识而在所有实际的重要问题中却都出现退化的局面。因为耦合会引起退化变量的久期运动, 于是我们要问, 这些问题量子理论该如何处理?

此处我们只考察最简单的情形, 看看扰动计算表示是否对合理的量子化有所启发。

将非退化变量用指标 α, β, \dots 表示, 退化变量用 ρ, σ, \dots 表示。

最简单的情形是这样的,

$$\overline{H}_1 = C_0 \neq 0. \quad (36)$$

这里的平均值覆盖非退化变量。 C_0 是 ω_ρ, J_ρ 的函数, 这些变量的久期变化由方程

$$\overline{H_1}(\omega_\rho, J_\rho) = W_1 \quad (36a)$$

决定。我们假设这个方程可用分离变量法求解。可如此引入新的变量 ω_k, J_k , 使得 $\overline{H_1}$ 不依赖于 ω_k ⁸⁾。我们假设没有因此出现新的退化, 即所有的久期频率满足

$$v_\rho = \frac{\partial \overline{H_1}}{\partial J_\rho} \neq 0 \quad (37)$$

至此经典程式可以不见改动安全地移植到量子力学。

记函数 Φ 的纯周期部分为

$$\tilde{\Phi} = \Phi - \overline{\Phi}, \quad (38)$$

则由方程

$$\sum_a v_a \frac{\partial S_1}{\partial \omega_a^0} + \tilde{H}_1 = 0 \quad (39)$$

S_1 只能决定到一个关于 ω_ρ^0 的任意函数 S_1^* 的程度,

$$S_1 = S_1^0 + S_1^* \quad (40)$$

如下的近似方程

$$\sum_a v_a \frac{\partial S_2}{\partial \omega_a^0} + H_2 = W_2 \quad (41)$$

成立, 其中采用了简记

$$H_2 = \sum_\rho \frac{\partial H_1}{\partial J_\rho} \frac{\partial S_1^*}{\partial \omega_\rho^0} + H_2^*, \quad (42)$$

$$H_2^* = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 H_0}{\partial J_\alpha \partial J_\beta} \frac{\partial S_1^0}{\partial \omega_\alpha^0} \frac{\partial S_1^0}{\partial \omega_\beta^0} + \sum_a \frac{\partial H_1}{\partial J_a} \frac{\partial S_1^0}{\partial \omega_a^0} \quad (43)$$

我们将关于 ω_α 的平均用一杠表示, 关于 ω_α 和 ω_ρ 的平均用两杠表示, 则有

$$\overline{H_2} = \sum_\rho v_\rho \frac{\partial S_1^*}{\partial \omega_\rho^0} + \overline{H_2^*} = W_2 \quad (44)$$

若得到了

$$W_2 = \overline{\overline{H_2^*}}, \quad (45)$$

于是有

$$\sum_\rho v_\rho \frac{\partial S_1^*}{\partial \omega_\rho^0} + \overline{\overline{H_2^*}} = 0, \quad (46)$$

$$\sum_a v_a \frac{\partial S_2}{\partial \omega_a^0} + \overline{\overline{H_2^*}} = 0 \quad (47)$$

由式(46)可以将 S_1^* , 式(47)可以将 S_2 , 分别决定到一个关于 ω_ρ 的任意函数 S_2^* 的程度。

若将讨论局限于二阶扰动, 则此程式可以就此截断, 公式(45)与(43)同(13b)的比较表明, W_2 可表示如下,

$$W_2 = - \sum_{(v\tau) > 0} \sum_a \tau_a \frac{\partial}{\partial J_a} \left(\overline{\left| \frac{C_\tau}{(v\tau)} \right|^2} \right) \quad (48)$$

其中 C_τ 是 H_1 根据非退化变量 ω_α^0 的傅里叶展开(即为 ω_ρ^0 的函数)的系数, 而顶上的杠表示对 ω_ρ^0 的平均。如此就清楚了, 量子理论的耦合能 $W_2^{(qu)}$ 可以如(33)式那样构造, 其中只需 $\Gamma(n, n')$ 是对应平均值 $\overline{|C_\tau|^2}$ 的量。

更困难的是应用中更经常遇到的也是更重要的情形, 即关于 ω_ρ^0 恒有

$$\overline{H_1} = C_0 = 0 \quad (49)$$

这样, 常用的确立久期扰动的做法就失效了。

如海森堡与本文作者在分子模型的一般性研究中所表明的那样⁹⁾, 先用正则替代撇掉扰动函数中的 H_1 (可能还含有 $\lambda^2 H_2 + \dots$)。将问题限制在二阶扰动, 由此得到的公式几乎与我们刚使用的相同。自方程

$$\sum_a v_a \frac{\partial S_1}{\partial \omega_a^0} + H_1 = 0 \quad (50)$$

(因为 $\overline{H_1} = 0$ 故与式(39)相符合)得到一个待定的函数 S_1 ; 解的形式为 $S_1 = S_1^0(\omega_\alpha^0, \omega_\rho^0) + S_1^*(\omega_\rho^0)$, 其中 S_1^0 是确定的, 而 S_1^* 是任意的。为了让 S_1 是确切的, 可以要求(关于 ω_α^0 求平均的) $\overline{S_1} = 0$ 。如此, 可得

$$H = H_0 + \lambda^2 H_2 + \dots, \quad (51)$$

其中

$$H_2 = \sum_\rho \frac{\partial H_1}{\partial J_\rho} \frac{\partial S_1}{\partial \omega_\rho^0} + H_2^*, \quad (52)$$

$$H_2^* = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \frac{\partial^2 H_0}{\partial J_\alpha \partial J_\beta} \frac{\partial S_1}{\partial \omega_\alpha^0} \frac{\partial S_1}{\partial \omega_\beta^0} + \sum_a \frac{\partial H_1}{\partial J_a} \frac{\partial S_1}{\partial \omega_a^0} \quad (53)$$

ω_ρ^0 和 J_ρ 的久期运动根据经典力学由方程

$$\overline{H_2}(\omega_\rho^0, J_\rho; J_\alpha) = W_2 \quad (54)$$

给出, 此方程显然有形式

8) 见 M. Born, W. Pauli jr., ZS. f. Phys. **10**, 137, 1922; 参见公式(24), (25), (26), S. 151.

9) M. Born, W. Heisenberg, Ann. d. Phys. [4] **74**, 1, 1924.

10) 见前面的论述。

$$\overline{H}_2 = \sum_{\rho} \frac{\partial \overline{H}_1}{\partial J_{\rho}} \frac{\partial S_1}{\partial \omega_{\rho}^0} - \sum_{(\nu\tau) > 0} \sum_{\alpha} \tau_{\alpha} \frac{\partial}{\partial J_{\alpha}} \left(\frac{|C_{\tau}|^2}{(\nu\tau)} \right) = W_2, \quad (55)$$

藉此可以利用求平均实现量子力学的过渡，因为关于 $J_{\alpha} = h(n_{\alpha} + \mu\tau_{\alpha})$ 的第二项乃为关于 μ 的差分商。问题是，针对第一项发生了什么？暂时看来尚不可能通过形式考察来决定这一点。

为了对情况详加说明，可以考虑海森堡¹⁰⁾用以表示多重态和反常塞曼效应的公式。不过，具体采用的是一个极大简化了的替代模型，即原子由原子实和电子(或者多个电子)组成，组成部分在动力学意义上只能用其转动角动量矢量的大小和方向标识。海森堡假设两种不同的偏离经典规则的方式：1. 他引入了一个原子实、电子和磁场间的交换作用能 $H^{(kl)}$ ，可以“经典地”计算，但作了小改动，即原子实的拉莫进动是经典理论中的两倍，而量子数 $J, R, K_1, K_2 \dots$ ，分别属于原子的总角动量 j ，原子实的角动量 r ，电子的角动量 $k_1, k_2 \dots$ ，可以取半整数。2. 他从这个准经典的 $H^{(kl)}$ 利用某种平均过程构造了量子的 $H^{(qu)}$ ；对于电子各以所选择的坐标可以写成如下形式：

$$H^{(qu)} = \int_{-1/2}^{1/2} H^{(kl)} dJ = \int_0^1 H^{(kl)} dP_k.$$

在多电子情形可取

译者注

1. 本文是据笔者所知第一篇关于“量子力学”的论文，其内容不出意外是引入了量子化条件的经典力学，它涉及的是经典力学之最高深的部分。读者如感觉理解有困难，可参阅 V. I. Arnold, *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (GTM 60) 之第 10 章也即其最后一章。
2. 德语的 Störung, 对应英文的 perturbation, 汉译“微扰”，其中的“微”字是诬陷。Störung, perturbation 是扰动，可小可大，小的扰动一般是要通过加形容词强调的。此处译为“扰动”。
3. Entartung, degeneration, 意思是“退化”，是一个在生物学和数学中非常悠久的历史概念。“简并”的译法，我瞎猜哈，

$$P_{k_1} = P_{k_1}^0 + \tau_1 \mu, \quad P_{k_2} = P_{k_2}^0 + \tau_2 \mu, \dots (\tau_1, \tau_2, \dots = \pm 1)$$

与此同时构造

$$H^{(qu)} = \int_0^1 H^{(kl)} d\mu,$$

此一规则同我们的公式之间的相似性跃然眼前；不过不可以随便将之理解为我们规则的特例。原因是，反常塞曼效应牵扯既有本征的也有偶然的、那种纠缠类型的极限退化。海森堡的规则或许可以作如下方式理解：

他称之为 $H^{(kl)}$ 的量可这样得自用公式(55)定义的扰动能量 \overline{H}_2 ，让涉及所有非退化变量的第二项过渡到量子力学；记其为 \overline{H}_2^* ，则海森堡的准经典运动方程为

$$H^{(kl)} = \overline{H}_2^* = W_2.$$

退化变量的久期运动由此决定。将 \overline{H}_2^* 用所属的量子数表达，则现在可基于此去完成向量子力学(直线积分)的过渡了。

若这样的理解是正确的(目前很难回答)，容易类比得出结论，同样的过程总是可应用于二阶的久期扰动(55式)。

我们满意地表明，从一般量子力学的观点来看，如海森堡所采用的关于量子积分的那些方法构造是自然的、毫不勉强的。

是根据量子力学中多个能级有相同的能量(哈密顿算符的矩阵有多个本征矢量对应相同的本征值)的情形而构造的，与原词的字面意思无关。在量子力学的语境中，Entartung 指希尔伯特空间中有对应同一能量的子空间，是一种退化行为。“简并”的译法，给数学和物理学的中文传播带来不少困惑，比如“简并半导体”就让人摸不着头脑。此处一概译为“退化”。

4. 作者用脚注方式所给的参考文献是原文照录，其中可能会妨碍文献检索的部分，比如连词“und”会被用逗号替代。
5. 原文有些地方可能是排版错误，会以 {} 中的译者注的方式加以说明。