

物理学咬文嚼字之五十七

简并

曹则贤

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

But yet an unison in partition...

—William Shakespeare in *A Midsummer Night's Dream*¹⁾

摘要 Degeneration, 汉译退化或简并, 相关词汇包括 degenerate, degeneracy, degenerative 等。矩阵本征值问题联系着数学里的退化和物理里的简并。即便在物理学领域, 简并也有不同的意思。

笔者当年用中文学物理时遇到的一个特别令俺困惑的概念就是简并。简并, 什么意思? 简单地并列, 因为简化所以并列了, 甄别后加以并列, 还是象竹筒那样并列? 苦思无解。好在俺对物理学整体上都是稀里糊涂的, 倒也不在乎哪个概念格外地恼人。及至后来读洋文文献, 发现简并指的是 degeneration (形容词形式为 degenerate 和 degenerative; 另一名词形式为 degeneracy), 对应的德语词为 Entartung。这个词, 何以被翻译成简并, 有探讨的必要。

Degenerate, 来自 de (from)+genus。大家知道 genus (race) 一词来自希腊语, 和女性、生产有关, 所以 degenerate, 按照 *Webster* 大字典的解释, 就是 “to become unlike one's race (变成非其族类)” 的意思, 但强调是朝着

deteriorated 方向的, 因此有退化、败坏的意思。比如, 在短语 degeneracy and bestiality 中, degeneracy 代表的德行败坏可是和禽兽行为 (bestiality) 并列的²⁾。如果说一个人是 a degenerate person, 那这家伙不仅道德败坏, 而且还可能是个性变态 (sexually perverted)。在德语中, degeneration 对应的名词是 Entartung (动词形式为 entarten)。字面上明确显示其本意为 “去分化(分类)”。 “去分化”, 或者退化, 就是在类别上变得少一些, 这就接近 degeneration 在数学和物理中的用法了。

在数学文献中, degeneration (degeneracy) 是常被译成 “退化” 的。按照 Google 的解释, degeneracy 指 a limiting case in which a class of object changes its nature so as to belong to another,

usually simpler, class (退化是指这样的极限情形, 一类对象改变其性质从而变得属于一个通常是更简单的类属)。这方面的例子比比皆是。当半径缩小到为零时, 圆退化成一个点, 所以说点是一个 degenerate circle (退化的圆)。只包含一点的集合是退化的连续统。再举一个例子。若 $A(v, w)$ 表示两个矢量定义的平行四边形的带方向的面积, $A(v, w) = v \wedge w$, 显然应该有 $A(v, v) = 0$ 。这是说由单一矢量 v 定义的退化平行四边形(两个边重合了), 其面积为零。

退化的概念在数学中随处可见, 但细微的意义还是要仔细辨别的。概念在字面上可能只是一个, 但指代的情景(物理上称为图像)却各不相同。比如, 黎曼流形和赝黎曼流形之间的关键区别是后者的度规张量不必是正定

1) 莎士比亚戏剧《仲夏夜之梦》中的一句: (看似)分开的一体。An unison 的写法可能不符合现代英语, 但原文如此。——笔者注

2) 人类用 bestiality(兽行)一词来谴责人类的一些个体或团伙令人发指的恶行是一种臭不要脸的作派。考察一下科学技术的发展史, 尤其是在折磨同类的刑具上和屠杀同类的武器上所展现的聪明才智, 那些行为可是禽兽自愧弗如的。——笔者注

的。对于后者，代之以一个弱的非退化条件(weak condition of nondegeneracy)。这里的退化是什么意思，当然要放到具体的语境中去理解。贖黎曼流形的度规张量可以化成标准的对角化形式，其中为正的、为负的和为零的项的数目分别记为 p 、 q 和 r ，与基的选择无关，因此度规张量可以用 (p, q, r) 标记。所谓的 non-degenerate 度规张量，指的是 $r = 0$ 的情形(度规张量没有为零的本征值)。我们入门时学的黎曼流形，对应的是 $r = 0$ 和 $q = 0$ 的情形。

一个有趣的横跨数学和物理的对象是圆锥曲线(conic section)。用一个平面去切割圆锥，得到的可能结果包括点、一条直线(或两条交叉的直线)、圆、椭圆、抛物线和双曲线³⁾(图1)。可以想见，讨论相关问题时 degeneration 是绕不过去的话题。当圆锥的顶角为零时，圆锥面退化为圆柱面。圆是椭圆的退化，从方程 $r = \frac{l}{1 - e \cdot \cos \theta}$ 容易看出，当偏心率 e 趋近于零时椭圆变为圆。还可以从另一个角度谈论圆锥曲面：给定平面上任意五个点，可以决定一条圆锥曲线。若五个点中没有三个点共线，则是 non-degenerate(非退化)的情形。

一个 n -阶多项式，generically⁵⁾有 n -个不同的根。如果有一些根是重根，则称它们是退化的。这套说法可以顺畅地移植到矩阵(量子力学算符)的本征值问题：若几个本征矢量(态)对应同一个本征值，即矩阵的特征多项式方程有重根，则该本征值就是 a degenerate eigenvalue。而 degenerate eigenvalue 就让我们很容易过渡到物理学上的简并

态这套说辞。我猜测，“并”是指物理状态的两个或多个不同的物理状态在某个较粗糙的层面上，或者粗略地，被当成并列的了。当引入更多的标签，或者在更挑剔的目光下，它们可以被分辨开来。精细结构讨论的，其实就是如何理解或者辨别简并态的问题。

一门量子力学，本质上不过是试图用自伴随二阶微分算符的本征值问题去诠释物理现实⁶⁾。连接数学和物理的本征值与本征矢量(态)的概念，也见证了 degeneracy 在汉语中从退化到简并的转变。一个体系的哈密顿量，若其某个本征值对应多个本

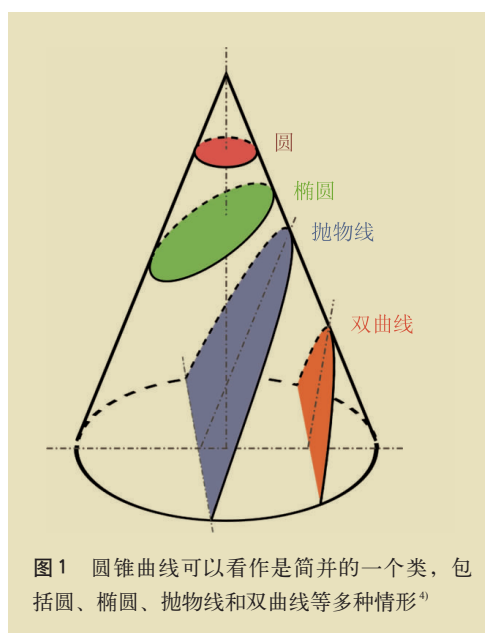


图1 圆锥曲线可以看作是简并的一个类，包括圆、椭圆、抛物线和双曲线等多种情形⁴⁾

征态，则称该本征值对应的能级是简并的。对于自伴随二阶微分算符，不同本征值对应的本征态是正交的，则当出现简并的时候，简并的几个本征态就未必是正交的。算符的正交性证明中，简并性就是个漏洞¹⁾。不过没关系，总可以将这些简并的状态加以线性组合，得到一组正交的简并态。在这个过程中，线性组合的系数还留有 $g_i(g_i - 1) / 2$ 个自由度， g_i 是简并度(degeneracy)，因此这为利用别的算符(力学量)的本征值来区分这些简并态留有足够的余地。这也是要选择多个力学量的共同本征态描述体系的原因。若体系有

3) 作为开普勒问题的解，它们对应的体系能量按照这个顺序由低到高。——笔者注

4) 这四类圆锥曲线可由一个点(focus)和一条线(directrix)以及到这两者距离的比值(偏心率, eccentricity, 用 e 表示)所表征。 $e = 0$, 对应圆; $e < 1$, 对应椭圆(ellipse); $e = 1$ 对应抛物线(parabola); 而 $e > 1$ 对应双曲线(hyperbola)。如果注意到 ellipse 是“比完美差一点”, parabola 是“刚刚好”, 而 hyperbola 是“有点过了”的意思, 你会有会心一笑的感觉, 从这些词可以联想到相应开普勒轨道对应能量的高低。不着边际的汉译有时真的很耽误事。——笔者注

5) 和 generally 同源。有人将之汉译为“属类地”, 有点怪怪的, 也有人就将之译为“一般地”。——笔者注

6) The so-called quantum mechanics is, in a loose sense, nothing but the effort to interpret the physical reality with the eigenvalue problem of self-adjoint second-order differential operators (一阶微分算符如 \hat{x}, \hat{p} , 可是要另外讨论的)。这一精神, 薛定谔 1926 年的四篇系列文章的题目是说清楚了。这就是我对量子力学的认识。若量子力学跳不出这个旧框框, 其对物理的贡献未必能走多远。——笔者注

两个非对易的守恒量，则其能级一般是简并的。

在物理学文献中一遇到 degeneration 等词就把它翻译成简并，可能有失严谨。例如，degenerate semiconductor 被翻译成简并半导体，如果从量子力学的简并概念来理解它，可能就一头雾水。A degenerate semiconductor 指重掺杂的半导体，杂质能级形成了 impurity band，把带隙给塞满了，材料的电导等性质已经更象是金属了。从这个意义来说，degenerate semiconductor 应该译为退化半导体。通过掺杂能实现 degenerate semiconductor 的案例很多，如在 Cu_3N 的立方晶格的中心位置上就可以掺入大量的其它金属原子，实现从宽带半导体到金属的转变，其间甚至会出现超过 200 K 的大温区内等电阻率的材料^[2]。

当费米子构成的物质的密度很大时，这对应温度很低、压力很大的状态，低能态被满满地占据。这样的状态也被描述为全简并的(at full degeneracy)。不过，这里 degenerate 的意思，显然不是说体系的能级对应多重态。当一个星体的压力因为自身的引力达到一定程度时⁷⁾，电子会占据尽可能低的能级(有文献说电子的波函数开始有 overlap，不知道是啥意思)，这样的状态是简单的。白矮星中的电子就是这种意义下简并的。1930 年，在前往英国的船上，钱德拉塞卡

(S. Chandrasekhar) 仔细考虑了简并电子气问题，认为当压力超过某个临界值时，它可以将电子简并状态压垮，电子和其中漂浮的质子会生成中子。将这个临界压力应用到白矮星上，得出的临界质量就是所谓的钱德拉塞卡极限(1.44 个太阳质量)。在这样的甚至更高的压力下，中子也是处于尽可能低的能量状态，是简并的体系。可以想象，当压力超过某个临界值时，中子简并构成的体系也会被压垮。这个临界压力对应的质量下限就是所谓的 Tolma—Oppenheimer—Volkoff 极限。这个极限是多大，目前还没有定论。在许多文献中，有人把简并等价于一种斥力，有所谓 degeneration pressure 的说法，笔者觉得有点莫名其妙。一个体系如果处于质子、电子或者中子的简并状态(full degeneracy)，该体系的压力一定是高的。但这个压力是唯一地由引力提供的。压力就是压力，它就在那里，体系也将自己调节到这个压力对应的热力学和量子力学状态，它不需要一个别的压力将(引力引起的)压力平衡掉。所谓的 degeneration pressure 的说法，哪里需要它呢？

玻色子可以占据同一个量子态，因此在接近绝对零度的某个温度下，玻色子会处于一个基态量子态上。不管这个基态是单一的，还是多重的，它都被称为 degenerate。愚以为此时还是译

成“退化的”更贴近实际的物理图像。这个所谓的 Bose—Einstein degeneracy 算是彻底地退化了的。处于玻色统计意义上的 degenerate systems 被称为玻色—爱因斯坦凝聚体^[3]，它们是能表现出量子行为的大尺度体系。

下面我还是专注于对能级多重性意义下的简并的讨论。能级简并的信息当然包含在哈密顿量的形式中(?)。一个体系的能级存在简并，那说明体系的哈密顿量存在某种形式的对称性。那些同一能级的简并状态，可能对应其它观测量(比如角动量)的不同值。也就是说在这些观测量中状态是简并的。角动量对应的简并是因为有转动对称性。晶体的平移对称性导致简并的晶格振动态，所以晶格振动只在第一布里渊区内考察即可。

通过研究哈密顿量的对称性，允许在未求得具体的解的情况下弄清楚简并的性质。Pauli 1926 年从群论出发解决氢原子问题。Pauli 的分析基于如下事实：平方反比有心力场中粒子的运动，存在作为守恒量的拉普拉斯矢量。它的三个分量，连同角动量的三个分量，是李代数 $\text{SO}(4)$ 的生成元。由该代数的二次型 Casimir 算符可得到类氢原子的束缚态能谱^[4]。此方法相对于薛定谔的解微分方程的优点是，它能自动得到谱线简并(degeneracy，意义应包括现象本身以及简并的

7) 压力象幸福一样，只能靠自己创造。一个星体所受的压力来自其自身的万有引力。这个事实再次说明，热力学中所谓外部压力的说法，相应地内能微分表达式中的 $-pdV$ 有个别扭的负号，是错误的选择。——笔者注

数量上的度⁸⁾的内容),而在薛定谔那里是被当作“偶发”对称性的后果的⁹⁾。当然,有些体系或者模型的哈密顿量无法严格计算或推导,而近似方法可能提升、降低体系的对称性,从而带来一些人人为的物理内容,如自旋玻色模型中存在量子相变的结论。要命的是,这种对称性的改变可能是不知不觉中被带入的,尤其是涉及无穷多项的时候。

能量态是否简并,未必是解量子力学方程就能确定的。哈密顿量形式本身还不知道对不对呢。氢原子的 $2^2S_{1/2}$ 和 $2^2P_{1/2}$ 能级在量子力学语境中就是简并的,但是实验发现它们之间的能量是有间隔的,此即所谓的Lamb-shift。此现象在量子电动力学中才得到解释。某个层面上的简并度,也许只是认识不足而已。氢原子的能级粗略地看是由主量子数 n 决定的,这个粗糙的理论正好和当时能提供的关于光谱的粗糙测量相适应。计入相对论和自旋效应,能级表示变为

$$\Delta E = -\frac{mc^2(Z\alpha)^4}{2n^3} \left(\frac{1}{j+1/2} - \frac{3}{4n} \right),$$

其中 $j=l \pm \frac{1}{2}$ ($l=0, j=1/2$)。

这即是谱线的精细结构,参数 α 被称为精细结构常数。当然,还可以计入电子自旋—轨道耦合、核自旋—转动、电四极矩等作用引起的能级分裂,统称为超精细结构。这里的思路是,当更细

节的相互作用被考虑时,进一步降低了体系的对称性,则造成了去简并。发现了一个简并,给出一个解释;又发现可能有新的简并,于是又给出新的解释;关于这些问题的理解就这样前行。

能级简并意味着哈密顿量中蕴涵关于某个力学量的对称性,如果施加一个扰动,也即加入一个关于此力学量的线性项(对称性是低了点),比如施加一个外电场、外磁场或者光场等,新的哈密顿量对应的能级可能会(部分地)分开,造成能级分裂(level splitting)。纯粹因为环境的不同,分子态因为隧穿效应也能退简并。电场和磁场带来的光谱的分裂,分别被称为Stark效应和Zeeman效应,而由于轨道和晶格之间相互作用引起的去简并则被称为Jahn—Teller效应。去简并,或曰退简并的现象很好理解。就象酒肉朋友,没有利益冲突时,你好我好可以穿一条裤子,处于简并态;遇到仁瓜俩枣的甜头,便立马翻脸不认人了,这就是去简并。

简并的解除,英文用的动词是lift。我怀疑to lift degeneracy就是对德语表达Entartung aufzuheben (aufheben,解除(咒语,法令))的直译。这个lift的用法,如同是在“how to lift a witchcraft spell(如何解除魔咒)”中一

样。解除魔咒需要王子的一吻,解除能级的简并,人们引入扰动(图2)。是否有不可以aufheben的简并呢,至少是不是通过改变体系对称性造成的退简并呢?有,那就是一类被称为拓扑序的东西。据说,量子自旋液体和Kitaev的toric code模型,在球面上基态是非简并的,而在圆环面上则有严格的简并基态¹⁵⁾。存在依赖于拓扑的基态简并是有拓扑序的哈密顿量的一个特征。基态简并现象的存在,使得热力学第三定律,即温度趋于绝对零度时体系的熵为零,失效了。

Degeneracy的重要性

简并(度)的概念在量子物理中的重要性,可从其在推导玻色—爱因斯坦统计和费米—狄拉克统计的过程中所扮演的角色加以评价。先说玻色—爱因斯坦统计。1900年,普朗克从构造的黑腔内能同熵的关系,即

$$\frac{\partial^2 S}{\partial U_v^2} = -\frac{k}{U_v(h\nu + U_v)},$$

得到了能够拟合黑体辐射曲线的公式¹⁰⁾,

$$e_v = \frac{4\nu^2}{c^2} \frac{h\nu}{\exp(h\nu/kT) - 1}$$

因为又要从玻尔兹曼的那套经典概率公式——即 N 个球放到 P 个盒子里有多少种方式的问题——得到同样的结果,所以引入

8) 这种一个洋文词同时对应两个不同侧面汉译的现象,时有发生。——笔者注

9) 微分方程解的简并情况,很难直接从微分方程看出来。不过,对微分方程的对称性分析这样的数学是有的。1990年,我在长江上坐船的时候带的就是这方面的书,可到现在也没学会!——笔者注

10) 那时还不知道光子有两种偏振态,或有简并度2,故此公式差个因子2。——笔者注

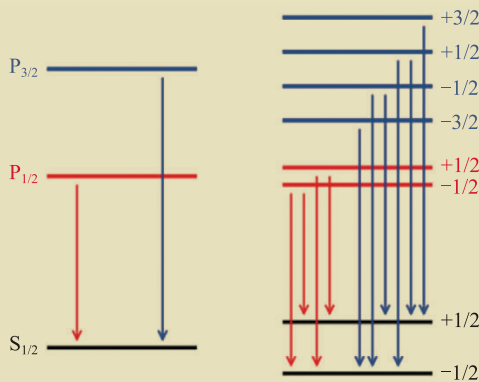


图2 左图为油画“睡美人”(Henry Meynell Rheam作), 王子的吻 lifts 施于公主的魔咒; 右图为磁场 lifts 电子能级的简并

假定 $U_v / h\nu$ 为一个整数。这就是开启量子时代的关键假设。1924年, 一个印度青年 Bose 写信给爱因斯坦, 说如果假设给定能量的光量子¹¹⁾还有不同的态的话, 也即若光量子的能级存在简并的话, 一样能得到普朗克公式^[6]。其推导如下: 设能量为 ε_i 的能级, 包含 g_i 个不可区分的亚能级, 由 n_i 个粒子所占据, 则不同占据状态数为 $W = \frac{(n_i + g_i - 1)!}{n_i!(g_i - 1)!}$ 。利用拉格朗日乘法计入总能量和总粒子数的约束条件, 得到熵最大时的分布为 $n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} - 1}$, 其中 $g_i \geq 2$ 。后来的研究表明, 光子确实有两个亚能级, $g_i = 2$, 对应两个极化(偏振)态。这就是玻色—爱因斯坦统计。

费米—狄拉克统计是关于电子的分布的。1926年, 人们已经确任意一个状态只能由一个

电子占据。设能量为 ε_i 的能级, 包含 g_i 个不可区分的亚能级, 由 $n_i = 0, 1$ 个粒子所占据, 则不同占据状态数为 $W = \frac{g_i!}{n_i!(g_i - n_i)!}$ 。同样利用拉格朗日乘法计入总能量和总粒子数的约束条件, 得到熵最大时的分布为 $n_i = \frac{g_i}{e^{\alpha + \beta \varepsilon_i} + 1}$ 。这就是费米—狄拉克统计^[7]。

在推导费米—狄拉克统计时, 用到的两个关键概念是不相容原理和简并现象(exclusion principle and degeneration phenomenon)。对于费米子来说, 不相容原理和简并现象如影随形。这两个原理之间的微妙关系, 在社会生活中也时有体现。比如, 副X长的位置至少原则是允许 degenerate 的, 而正X长的大位, 类似皇帝的宝座, 是 unique 的, 遵循不相容原理。覬覦大位的人, 只有成功和毁灭两

条路, 也难怪量子力学选择使用产生算符和湮灭算符的语言。中国历史上, 武则天在宫内与正牌皇帝李治平起平坐, 并称“二圣”, 是罕见的皇帝宝座上的简并现象。不过, 考虑到武则天和李治毕竟是两口子、一家人, 这就有点象有些复合费米子, 其表现出遵从玻色—爱因斯坦统计的行为倒也容易理解。

文章结束前, 将关于简并的洋文词再总结一下。Degeneration, 名词, 和 degeneracy 一样, 指存在简并的现象。不过, degeneracy 还有简并度的意思。一个能级的简并度, 就是能级的重数(multiplicity)。在德语中, 简并度用 Entartungsgrad 表示, 其中的度(Grad)这个词是显性的, 因此不会和简并这种现象(Entartung)相混淆。Degenerate, 形容词, 意为存在简并的, 如 degenerate energy level (简并能级), 而形容词 degenera-

11) 光子(photon)的概念要等到1926年才有。

tive 则意为造成简并的、有简并(退化)倾向的,物理学文献中也有把简并态写成 degenerative states 的,但是少见。

最后提及一下一个洋文概念在数学和物理两个领域中各自汉译的现象。Degenerate 在数学文

献中被翻译成退化,在物理文献中它被翻译成简并。似乎这种情况还有很多:vector 在数学中是向量,物理中是矢量(据说原来是倒过来的);field 在数学中是域,在物理中是场;等等。把同一个概念在数学和物理中给翻译

成不同的词,反映的是数学和物理学在这个国家的割裂,以及可能是由此造成的这个国家的科学家其个人数学知识和物理学知识的割裂。这样的科学和科学家,好象是只有一面的硬币,其价值是可疑的。

参考文献

- [1] Arfken G B, Weber H J. Mathematical Methods for physicists(6th edition). Elsevier, 2005, p. 636—638
- [2] Ji A L, Li C R, Cao Z X. Appl. Phys. Lett., 2006, 89: 252120
- [3] London F. Nature, 1938, 141: 643
- [4] Hirshfeld A. The supersymmetric Dirac Equation: the application to hydrogenic

atoms. Imperial College Press, 2012. 原文为:“The quadratic Casimir operator of this algebra then yields a formula for the spectrum of the bound-state energy levels of hydrogenic atoms. The advantage of this approach over Schrödinger’s method of solving a differential equation is that it automatically yields an understanding of the degeneracy of the spec-

tral lines, which is treated in the Schrödinger approach as an “accidental” symmetry.”

- [5] Frohlich J *et al* (eds.). Quantum theory from small to large scales. Oxford, 2010, p. 186
- [6] Bose S N. Z. Phys., 1924, 26: 178
- [7] Dirac P A M. Proceedings of the Royal Society: Series A, 1926, 112(762): 661

读者和编者

订阅《物理》得好礼

——超值回馈《岁月留痕——<物理>四十年集萃》

的关爱和支持,《物理》编辑部特推出优惠订阅活动:向编辑部连续订阅两年(2013—2014年)《物理》杂志的订户,将免费获得《岁月留痕——<物理>四十年集萃》一本(该书收录了从1972年到2012年在《物理》各个栏目发表的四十篇文章,476页精美印刷,定价68元,值得收藏)。

欢迎各位读者订阅《物理》(编辑部直接订阅优惠价180元/年)

订阅方式

(1) 邮局汇款

地址:100190,北京603信箱

《物理》编辑部收

2012年《物理》创刊40周年,为答谢广大读者长期以来的

(2) 银行汇款

开户行:农行北京科院南路支行

户名:中国科学院物理研究所

帐号:11250101040005699

(银行汇款请注明“《物理》编辑部”)

咨询电话:(010)82649266; 82649277

Email: physics@iphy.ac.cn

