

外斯的分子场理论虽获得了一定的成功，但分子场的起源问题却一直没有解决，直到20年后量子力学发展了才出现转机，1928年弗伦克尔首先正确指出分子场可以用原子间的特殊相互作用来解释，同年海森伯把氢分子中电子之间的交换作用同电子自旋的相对取向联系在一起正确地解释了铁磁体中的自发磁化现象，从此，人们才意识到所谓的“分子场”实际是电子之间交换作用的一种“平均场近似”。海森伯交换作用理论模型的建立，为铁磁量子理论的发展奠定了基础。

3.2 Heisenberg 直接交换作用模型

一. 氢分子中的交换作用

Heitler 和 London (1927)

1. 交换作用

2. 基态能量与电子自旋态的关系：交换能

二. Heisenberg 铁磁理论

1. Heisenberg 模型与分子场近似

2. 交换积分及铁磁性条件

三. 对Heisenberg 模型的评述

(见姜书 3.2节)

一. 氢分子中的交换作用 (CGS制)

1. 交换作用

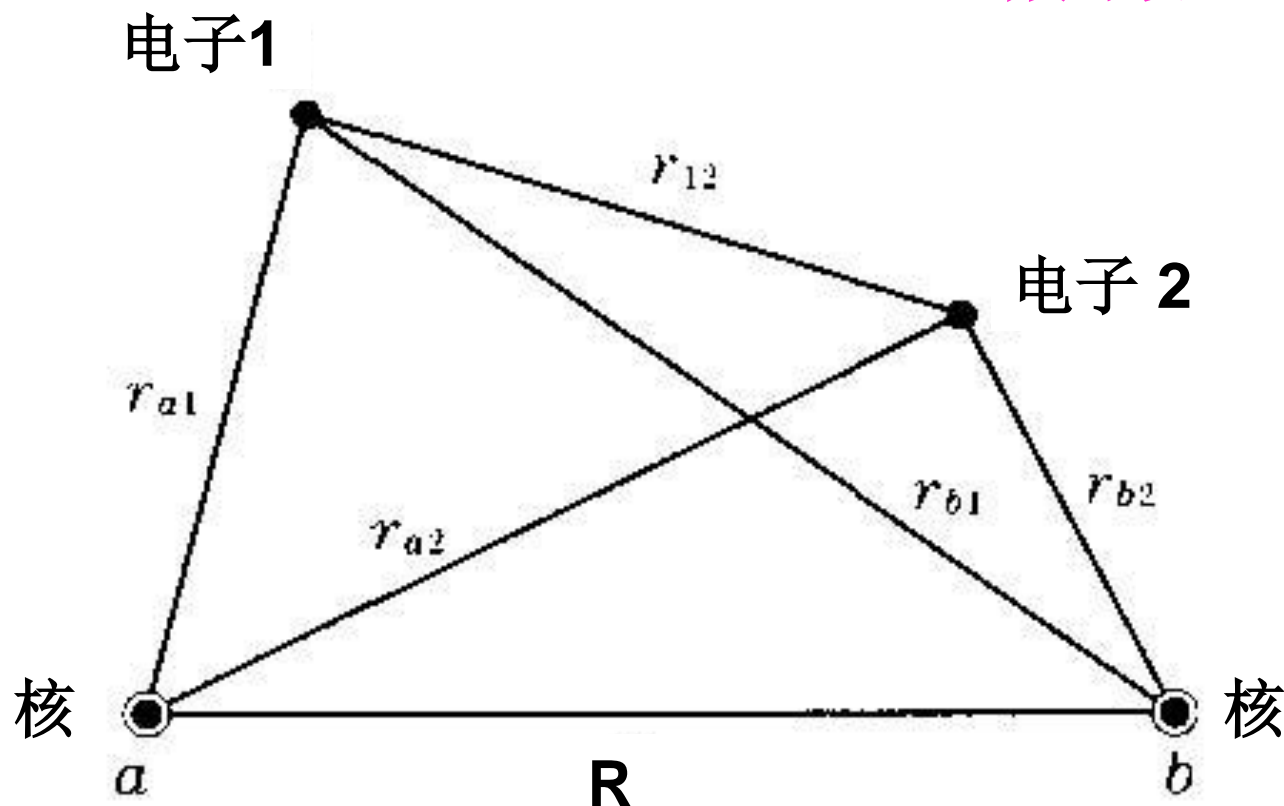
在一个氢分子体系中，由 a , b 两个氢原子组成， a 和 b 是两个氢原子的核，如果它们距离 R 很大，可以近似地认为是两个孤立的无相互作用的原子，体系的能量为 $2E_0$ 。如果两个氢原子距离有限，使原子间存在一定的相互作用，这时体系的能量就要发生变化。产生的相互作用如使体系能量降低，则体系稳定。

它们组成氢分子后，体系要增加核之间的相互作用项 e^2/R ，电子相互作用项 e^2/r ，以及电子和另一个核之间的交叉作用项 $(-e^2/r_{a2})$ 和 $(-e^2/r_{b1})$ 。氢分子体系的哈密顿量可写成如下形式：

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) - e^2\left(\frac{1}{r_{a1}} + \frac{1}{r_{b2}}\right) + e^2\left(\frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{a2}} - \frac{1}{r_{b1}}\right)$$

H_0 是两个孤立氢原子的哈密顿量

$W(1,2)$ 两原子的相互作用项



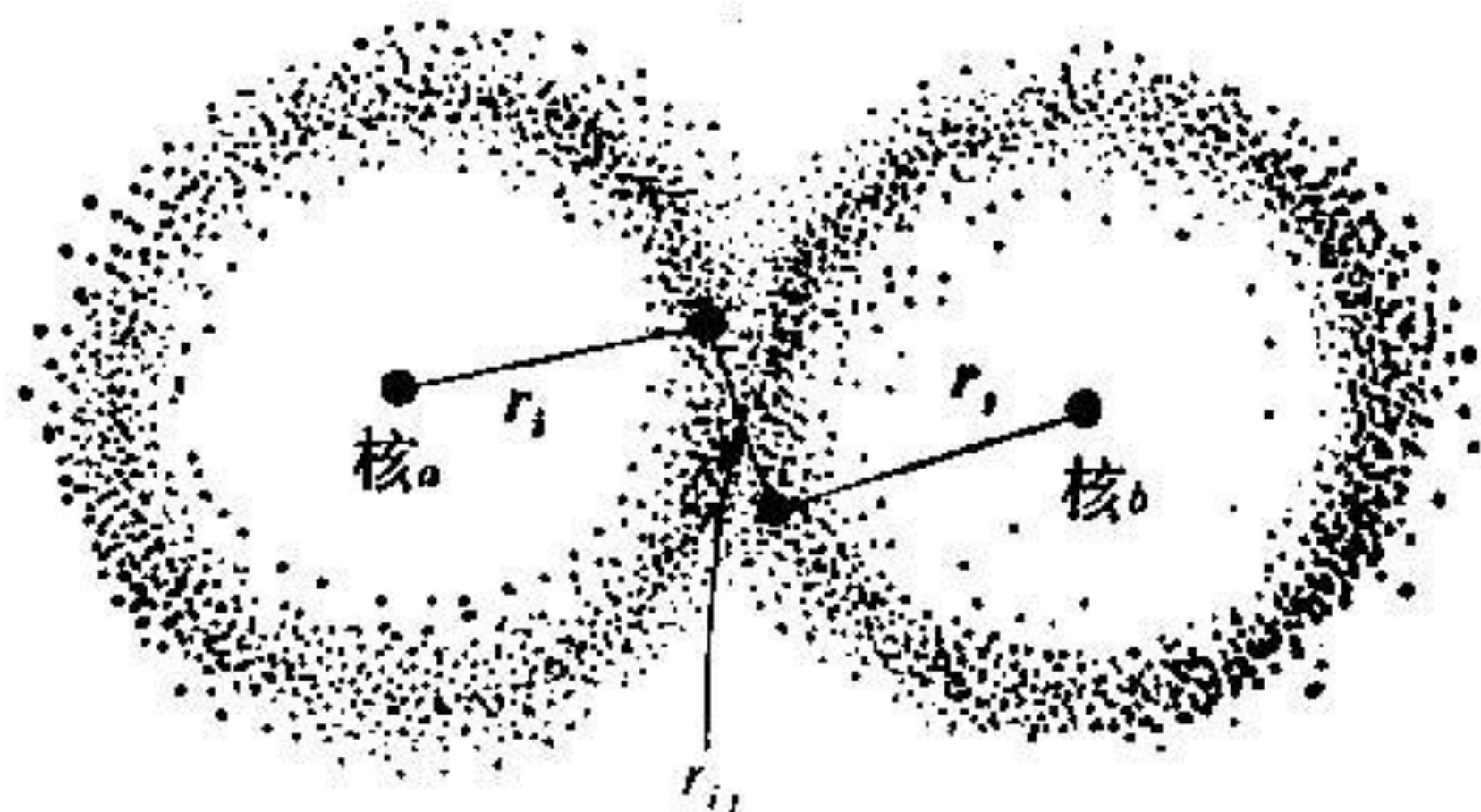


图 3.2 电子云分布的示意图,在中间部分有重叠.

按此 Hamilton 量直接求解 Schrodinger 方程是困难的，需要近似求解。以无相互作用时两个孤立原子的波函数 $\varphi_a(1)$ 和 $\varphi_b(2)$ 以及 $\varphi_a(2)$ 和 $\varphi_b(1)$ 为近似波函数，并考虑到两个电子自旋波函数的对称和反对称性，通过组合给出氢分子基态波函数的近似表达式（总的反对称要求）：

$$\psi_1 = C_1 [\varphi_a(1)\varphi_b(2) + \varphi_a(2)\varphi_b(1)] \phi_A(1,2) \quad \uparrow\downarrow$$

$$\psi_2 = C_2 [\varphi_a(1)\varphi_b(2) - \varphi_a(2)\varphi_b(1)] \phi_S(1,2) \quad \downarrow\downarrow$$

$\varphi_a(1)$ 是 a 原子中的电子 1 的波函数。 $\varphi_b(2)$ 是 b 原子中的电子 2 的波函数。 $\varphi_a(2)$ 是 b 原子中的电子 2 在 a 原子的波函数。 $\varphi_b(1)$ 是 a 原子中的电子 1 在 b 原子的波函数。

其中 $\phi_A(1,2)$, $\phi_S(1,2)$ 分别称为

自旋反对称波函数（自旋单重态）

$$\phi_A(1,2) = \varphi_{\frac{1}{2}}(1)\varphi_{-\frac{1}{2}}(2) - \varphi_{-\frac{1}{2}}(1)\varphi_{\frac{1}{2}}(2) \quad \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow$$

此时有： $S = 0, S_z = 0$

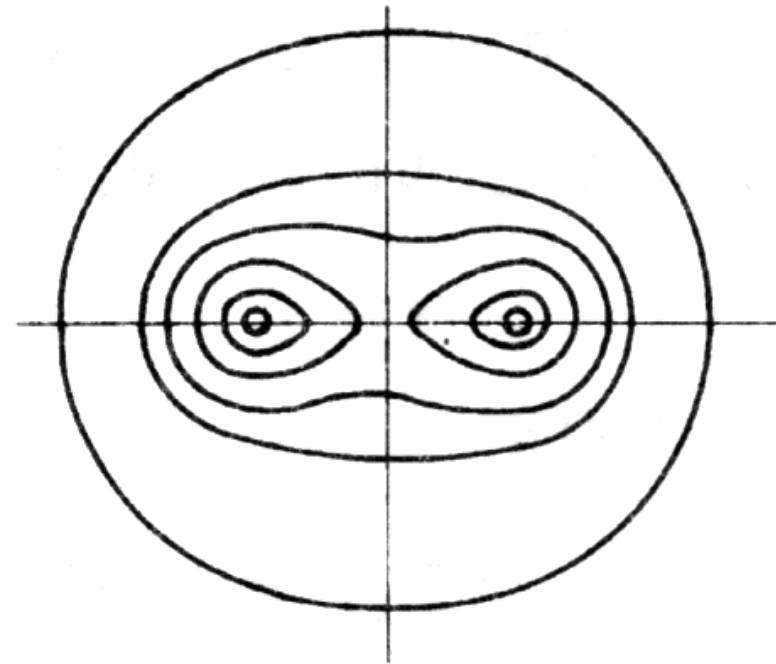
自旋对称波函数（自旋三重态）

$$\phi_s(1,2) = \begin{cases} \varphi_{\frac{1}{2}}(1)\varphi_{\frac{1}{2}}(2) & \uparrow\uparrow \\ \varphi_{\frac{1}{2}}(1)\varphi_{-\frac{1}{2}}(2) + \varphi_{-\frac{1}{2}}(1)\varphi_{\frac{1}{2}}(2) & \\ \varphi_{-\frac{1}{2}}(1)\varphi_{-\frac{1}{2}}(2) & \downarrow\downarrow \end{cases}$$

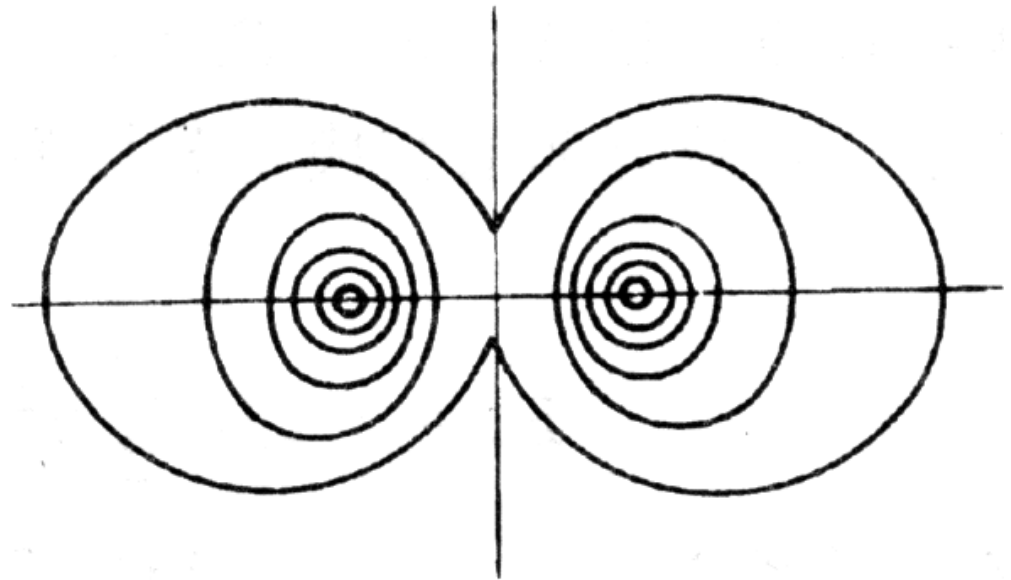
此时有： $S = 1$ ，而 S_z 有三个值：0, 1, -1。

ψ_1

ψ_2



(a) 自旋反平行



(b) 自旋平行

氢分子的两种电子云分布

该图取自《材料科学导论》（2002）p273

以 Ψ_1 , Ψ_2 为近似波函数, 求解薛定鄂方程, 得到对应于两种状态的能量分别为:

$$E_1 = 2E_0 + \frac{e^2}{R} + \frac{K + A}{1 + \Delta^2} \quad \text{单态}$$

$$E_2 = 2E_0 + \frac{e^2}{R} + \frac{K - A}{1 - \Delta^2} \quad \text{三态}$$

其中:

$$K = \iint |\varphi_a(1)|^2 \cdot V_{ab} \cdot |\varphi_b(2)|^2 d\tau_1 d\tau_2 \quad \text{库仑排斥能}$$

$$A = \iint \varphi_a^*(1) \varphi_b^*(2) \cdot V_{ab} \cdot \varphi_a(2) \varphi_b(1) d\tau_1 d\tau_2 \quad \text{库仑交换能}$$

$$V_{ab} = e^2 \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{b1}} - \frac{1}{r_{a2}} \right)$$

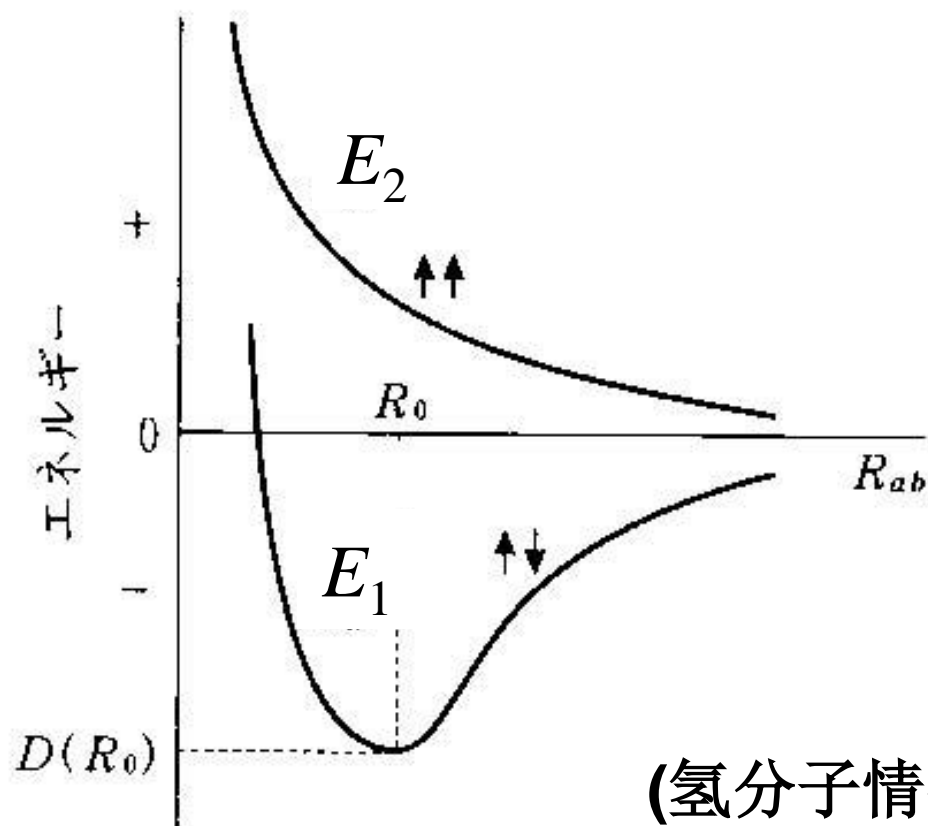
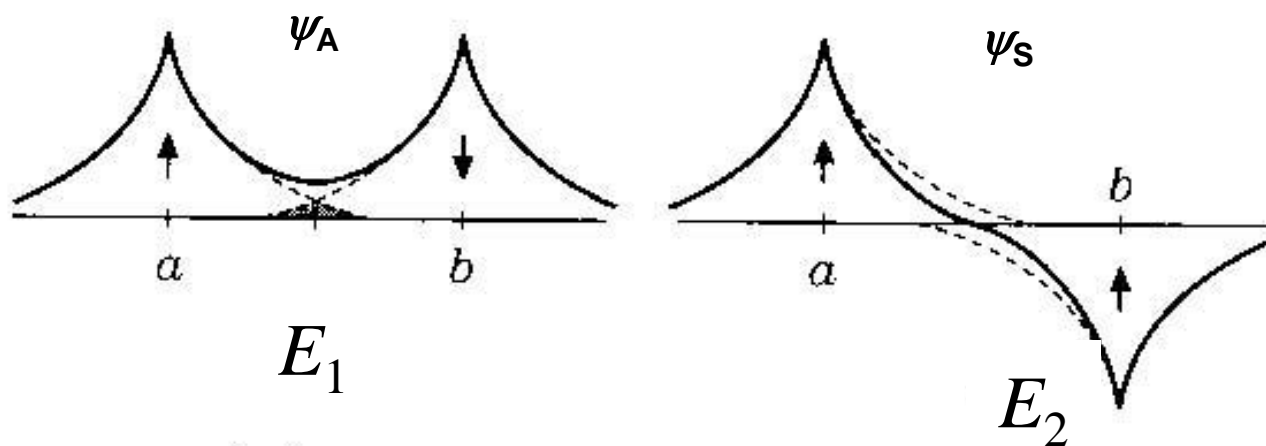
$$\Delta = \int \varphi_a(1) \varphi_b(1) d\tau_1 = \int \varphi_a(2) \varphi_b(2) d\tau_2 \quad \text{重叠积分}$$

K 是两个氢原子的电子间及电子与原子核之间的库仑能。

A 是两个氢原子中电子交换所产生的交换能，又称交换积分，
交换能是静电性质的，它的出现是量子力学的结果，来源于
全同粒子系统的特性。

对于氢分子， $A < 0$ ， $E_1 < E_2$ ，两电子的自旋相反，能量更低。所以氢分子基态电子磁矩为零，氢气呈现抗磁性。

由此，Heisenberg 受到启发,如果出现 $A > 0$ 的情况，使电子自旋平行排列能量更低，就会出现铁磁性。也就是说铁磁性可能来源于电子间的交换作用，他对产生自发磁化的“分子场”的实质作出了科学的判断。



(氢分子情况)

2. 基态能量与电子自旋态的关系

为了更好地反映**能量依赖电子自旋**取向这一特点，并方便以后的讨论，我们引入**交换能**的概念。在两个电子波函数正交的情况下，两种自旋取向的能量可以简化为：

两自旋反平行时 $E_1 = 2E_0 + \frac{e^2}{R} + K + A$ 自旋单重态

两自旋平行时 $E_2 = 2E_0 + \frac{e^2}{R} + K - A$ 自旋三重态

按照后来Dirac的表示，引入**自旋算符**（矢量） \vec{s}_1, \vec{s}_2

（以 \hbar 做单位）可以将两式合并为一个表达式：

$$E = 2E_0 + \frac{e^2}{R} + K - \frac{A}{2} - 2A(\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2)$$

自旋算符的表示： $\vec{S} = \vec{s}_1 + \vec{s}_2$

$$S(S+1) = S^2 = (\vec{s}_1 + \vec{s}_2)^2 = s_1^2 + s_2^2 + 2\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$$

$$|\vec{s}_1| = |\vec{s}_2| = \frac{1}{2} \quad s_1^2 = s_2^2 = s(s+1) = \frac{3}{4}$$

所以两电子**自旋平行排列**时：

$$S = 1, \therefore 2\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = \frac{1}{2}$$

两电子**自旋反平行排列**时：

$$S = 0, \therefore 2\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 = -\frac{3}{2}$$

如此，就把**自旋取向同能量**联系在一起了。

其中，后面一项我们称作**交换能**

$$E_{ex} = -2A\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$$

泡利原理所引起的能量对自旋取向的依赖性通过交换能表现出来。

当 $A < 0$ 时，自旋反平行为基础态，这是氢分子情形

$A > 0$ 时，自旋平行为基础态，这是可能出现铁磁性的条件**海森伯的讨论就从交换能开始。**

虽然是交换能导致了磁矩之间的相互作用，但从氢分子的例子中可以看出：它起源于原子之间的库仑相互作用 V_{ab} ，**交换能与磁矩间的联系完全是泡利原理的结果。**由于泡利原理，自旋取向的不同决定了电子空间分布的不同（对称或反对称），从而影响了库仑相互作用。所以分子场当作一个磁场作用来看虽具有难以理解的巨大强度(10^3 T)，但从量子力学效应来看，这是很自然的。

——黄昆书p417

对交换能的一些理解

交换能是泡利不相容原理的要求而引入的，所以这种交换力与库仑力数量级相当，对于氢分子，有两个电子在两个核的库仑场中运动，其电子自旋也就有两种可能的排列，或者平行，或者反平行。如果是平行的，不相容原理会要求电子远离；而如果是反平行，则电子可以靠的较近，其波函数显著交迭。然而两种排列的静电能量是不同的，因为当电子紧密靠近时，由于强的库仑排斥势，其能量要升高，这个因素只对自旋平行态有利，所以两个电子究竟处于哪一个态，取决于两个因素中哪一个占优势，对氢分子而言，其基态是两个电子反平行排列。

—— Omar: 固体物理基础p499

在经典理论中，有自旋的电子系统的库仑相互作用不可能与该系统的总磁矩有联系，而在量子力学中，则有这样的联系，像氢分子的例子：除了“半经典”的静电排斥作用之外，还出现了**与交换现象有关的附加静电能**，这种现象没有经典的类比，**它的存在是由电子的不可辨性引起的，并与泡利原理有关**，由于交换现象，静电相互作用所引起的那部分系统能量获得了附加的对磁化强度的依赖关系，**海森伯正是建议从这种依赖关系中寻找出现铁磁性现象的原因。**

参考冯索夫斯基《铁磁学》上p95

二. Heisenberg 铁磁理论

1. Heisenberg 模型与分子场近似

1928年, Heisenberg 首先将氢分子的交换作用推广到多原子系统, 他提出两点假设: ① N 个原子组成的系统中, 每个原子只有一个电子对铁磁性有贡献, ②只考虑不同原子中电子的交换。所以 N 个电子系统的交换能为:

$$E_{ex} = -\sum_{i<j}^N 2A_{ij}(s_i \cdot s_j)$$

由于交换作用是近程作用, 可以认为求和只对近邻,

$$E_{ex} = -2A \sum_{i<j} s_i \cdot s_j$$

在此基础上他给出了一个由交换能表示出的分子场表达式:

$$H_m = \frac{2zA}{N(g\mu_B)^2} M = wM$$

z 是最近邻原子数目

式中， z 是最近邻原子数， N 是单位体积的原子数。其中

$$w = \frac{2zA}{N(g\mu_B)^2}$$

分子场系数正比于交换积分，因此海森伯为分子场来源提供了量子力学的解释：**Weiss** 所假设的分子场不过是对电子间交换作用所做的**平均场近似**。而交换作用是电子之间的**静电作用**，纯属**量子效应**，它是电子的不可分辨性引起的，并与泡利原理有关。

将 w 代入 $T_c = w \cdot C$ 中，并假定只有自旋对磁矩有贡献：

$$T_c = \frac{N \cancel{\mu_0} (g\mu_B)^2 s(s+1)}{3k_B} w = \frac{2zA}{3k_B} s(s+1)$$

铁磁体的居里温度正比于交换积分，是铁磁体内静电交换作用强弱的宏观体现。

实际的铁磁体中，每个原子可能有多个电子对磁性有贡献。因此交换能实际应包括两部分：同一原子内电子间的交换能和不同原子间电子的交换能。第一部分的交换积分应该为正，因为正是这部分交换能使原子（或离子）中不满壳层的电子按洪德法则的第一条规定排布（服从泡利原理的前提下，使自旋量子数最大），上面讨论的是不同原子间电子的交换能。这时：

$$S_1 = \sum_i \vec{s}_i, \quad S_2 = \sum_j \vec{s}_j$$

$$E_{ex} = -2A \sum_{i < j} S_i \cdot S_j$$

在Heisenberg 模型中并未对此扩展做详细证明。Dirac的证明见戴书p204或姜书p132-136 的说明。虽然一般表达式如上，但为了说明交换积分 $A > 0$ 时可能导致铁磁性的实质问题，**下面我们还按一个原子只有一个未被抵消的自旋来讨论。**

由Heisenberg给出的交换能表达式，我们可以知道出现铁磁性的必要条件是 $A > 0$ 。Heisenberg 还曾推出了磁化强度随温度的变化规律（详见姜书p129-131），与分子场理论给出的结果（ $S=1/2$ ）基本相同。居里温度附近和0 K附近的变化规律同样和实验规律不符。（见姜书p132）其主要成就归结为两个表达式：

$$w = \frac{zA}{2N\mu_B^2} \quad T_C = \frac{zA}{2k_B}$$

因为Heisenberg模型基础上的精确计算与分子场理论相比并没有给出原则上的改变，我们不再仔细讨论。

Heisenberg模型的贡献在于揭示了分子场的本质，定性地给出了发生铁磁性的条件。

2. 交换积分及铁磁性条件

总结起来，Heisenberg 交换作用模型给出的铁磁性条件是：

- 1) 物质具有铁磁性的必要条件是原子中具有未充满的电子壳层，即有原子磁距。（ $S_i \neq 0$ ）
- 2) 物质具有铁磁性的充分条件是 $A > 0$ ，这里A 可以理解为广义的或等效的交换积分，且交换能可以表示为：

$$E_{ex} = -2A \sum_{\text{近邻}} S_i \cdot S_j$$

据此，我们可以定性地讨论实际物质中发生铁磁性的条件。

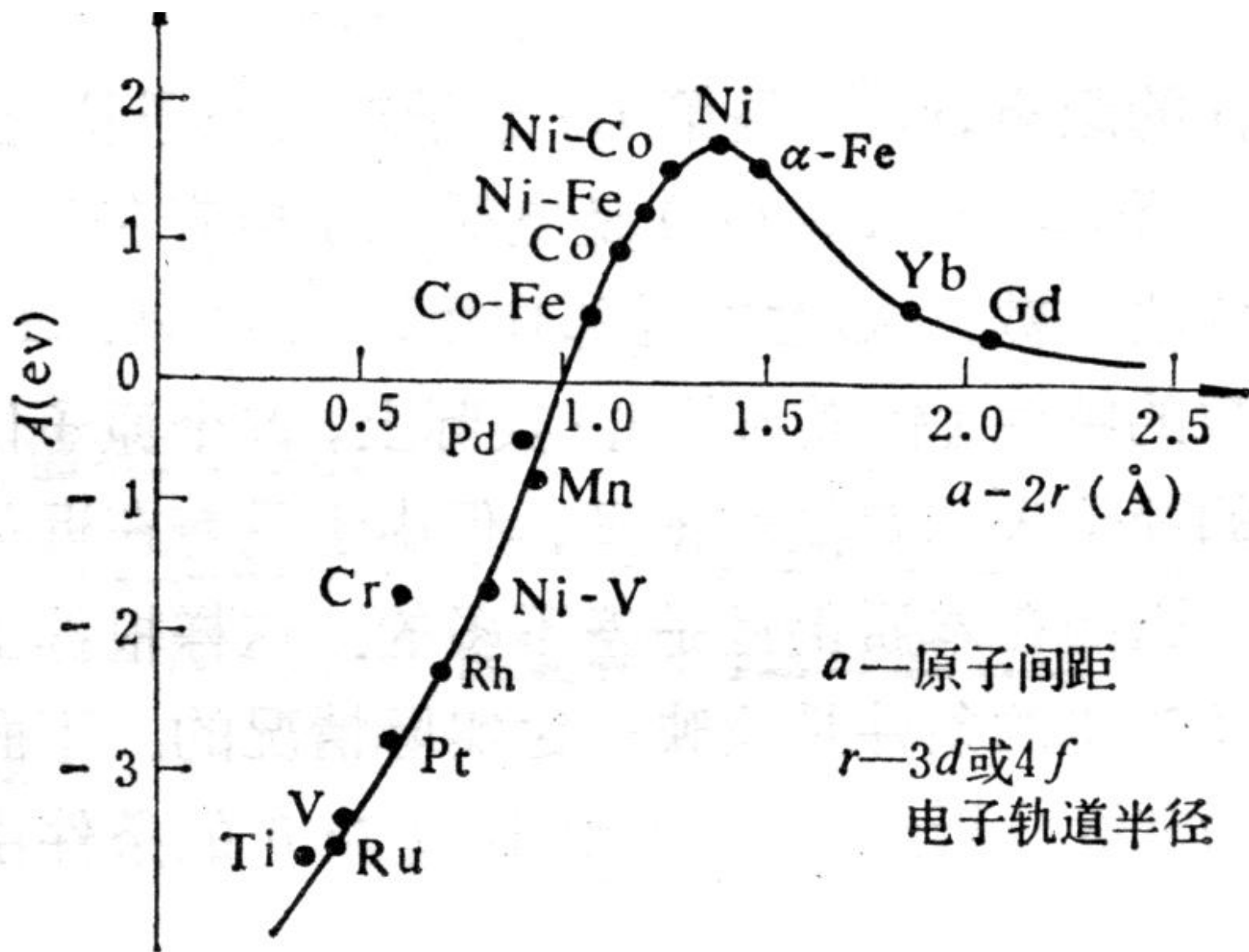
（有文献说：正的交换积分是铁磁性的必要条件，而不是充分条件。这与上面的说法并不矛盾。）

讨论 $A > 0$ 的条件

- 1) 两个近邻原子的电子波函数在中间区域有较多的重叠；而且数值较大， e^2/r_{ij} 的贡献大，可得 A 为正值；
- 2) 只有近邻原子间距 a 大于轨道半径 $2r$ 的情况下才有利于满足条件(1)。角量子数 l 较大的轨道态(如 $3d$ 和 $4f$)波函数满足这两个条件可能性较大。

铁族和稀土族未满壳层是 $3d$ 或 $4f$ ， l 较大，满足条件1，其原子间距主要取决于 s - p 价电子，所以间距要大于对磁性做贡献的壳层间距，满足条件2，易出现铁磁性。

奈耳（Neel）根据上述两个条件，总结了不同 $3d$ 和 $4f$ 等元素及合金的交换积分 A 与 $(a-2r)$ 的关系。从图中给出的 $A > 0$ 和 $A < 0$ 的情况与实际是一致的。



奈耳给出的交换能与 $(a - 2r)$ 的关系曲线。

Neel的结论与Bethe-Slater 曲线中Fe、Co、Ni的次序不同，后者更符合实际。

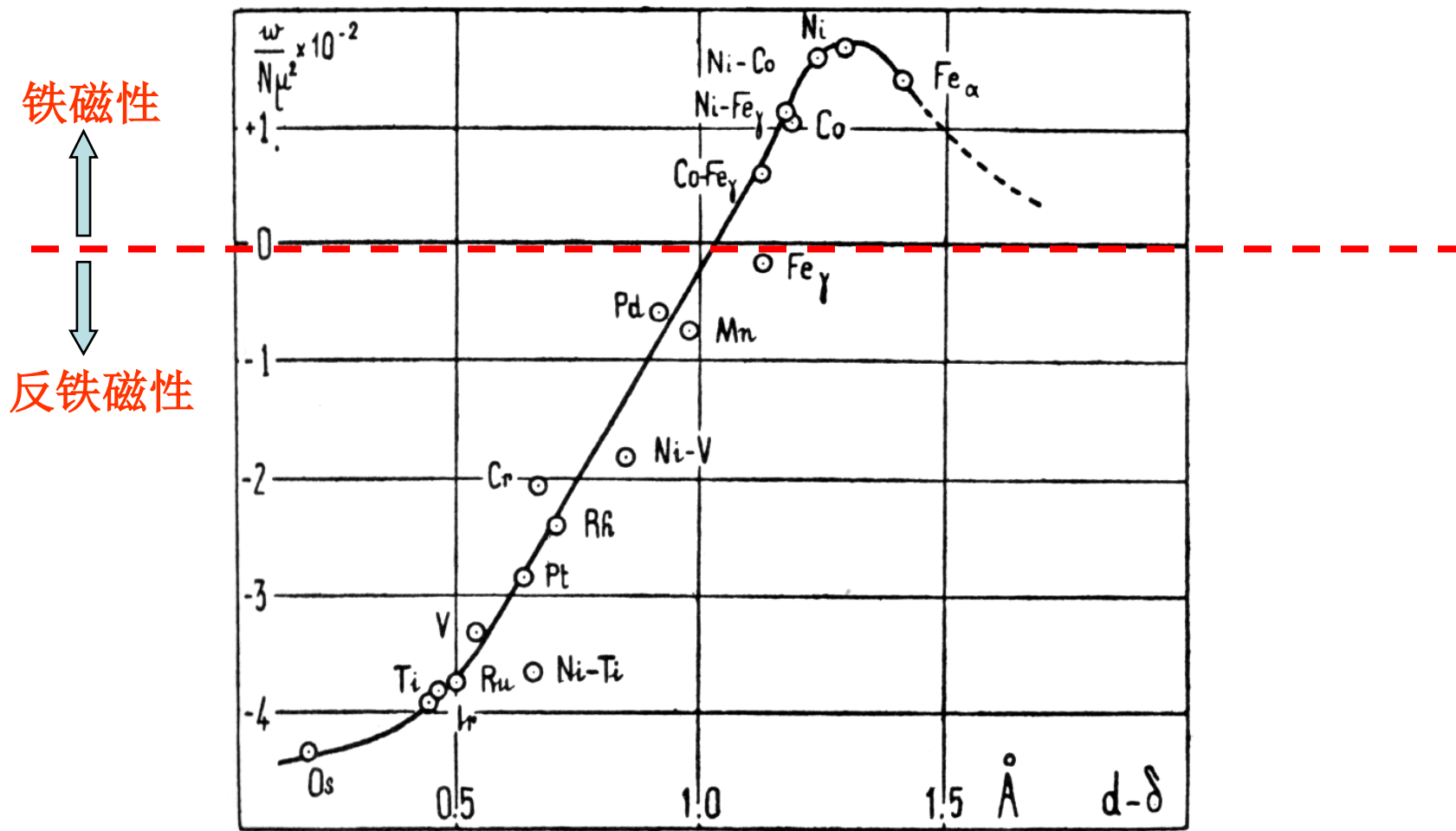


Fig. 5. — Le champ moléculaire en fonction de la distance des couches magnétiques

该图和下页表来自Neel的原始文献

Liaison	$\frac{w}{N\mu^2} \times 10^{-2}$	d	δ	$d - \delta$
Ti-Ti	− 3,72	2,92	2,46	0,46
V-V	− 3,47	2,63	2,09	0,54
Cr-Cr	− 1,79	2,49	1,82	0,67
Mn-Mn	− 0,79	2,58	1,61	0,97
Fe-Fe	− 0,33	2,57	1,44	1,13
Co-Co	+ 1,02	2,49	1,30	1,19
Ni-Ni	+ 1,67	2,49	1,19	1,30
Ru-Ru	− 3,77	2,69	2,19	0,50
Rh-Rh	− 2,40	2,69	1,98	0,71
Pd-Pd	− 0,59	2,74	1,82	0,92
Os-Os	− 4,40	2,71	2,54	0,17
Ir-Ir	− 3,93	2,76	2,32	0,44
Pt-Pt	− 2,88	2,76	2,12	0,64
Ni-Co	+ 1,58	2,49	1,25	1,24
Co-Fe	+ 0,60	2,49	1,37	1,12
Ni-Fe	+ 1,13	2,49	1,30	1,19
Ni-Ti	− 3,87	2,49	1,82	0,67
Ni-V	− 1,61	2,49	1,64	0,85

冯索夫斯基《铁磁学》上将铁磁性判据归结为：

1. 要轨道量子数 l 大的未满的电子壳层 (d 或 f)
2. 这些壳层的半径比起晶格中原子核间的距离来要小。

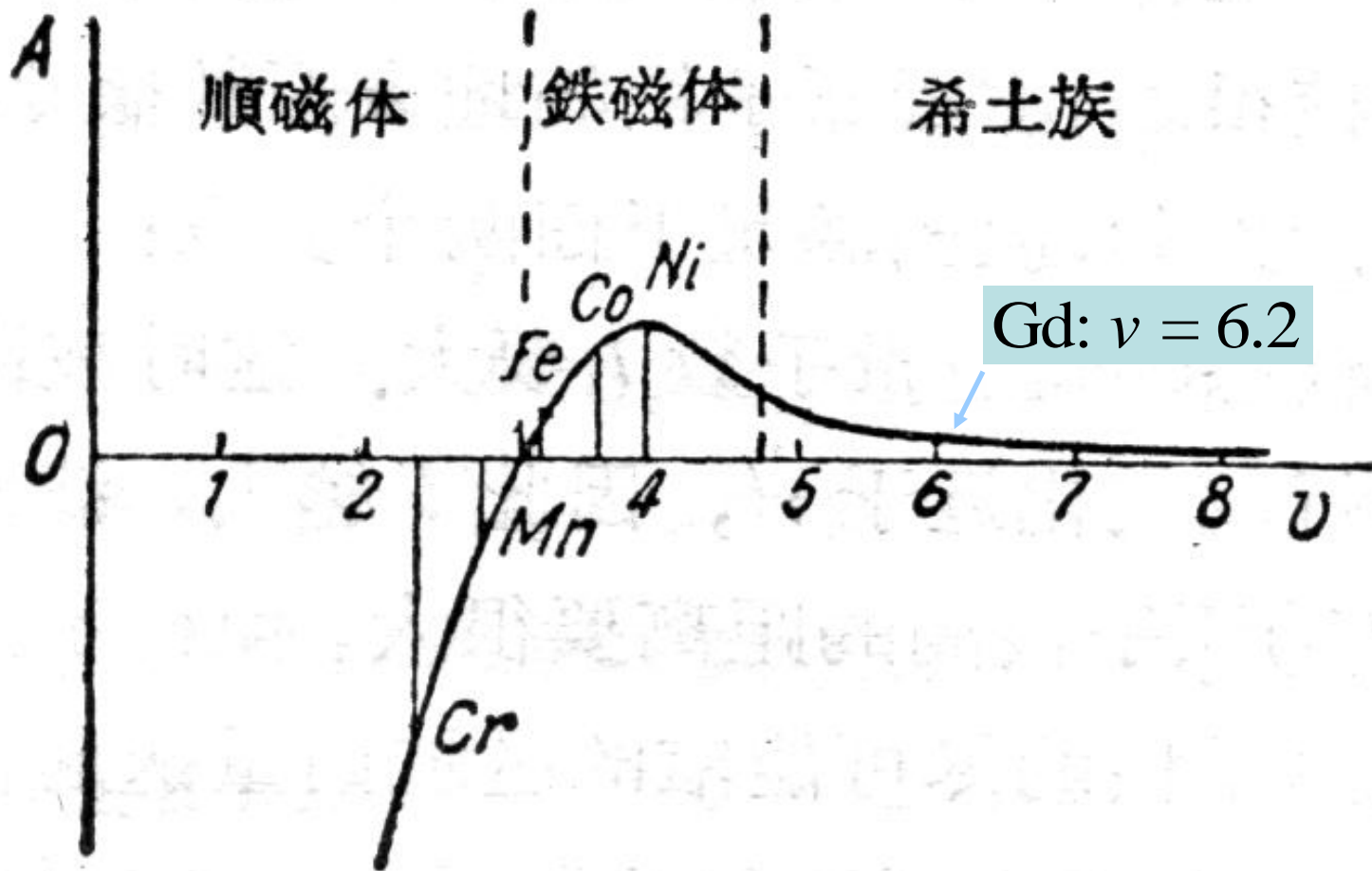
第一个条件对过渡族元素的电子层来说总是可以满足的，第二个条件Slater(1930)认为，铁族元素能最好的满足，为了定量地表征这第二个条件，他给出如下数据：

表4 晶格中原子间距离与未滿壳层的半径之比 ν
[G. 贝特、A. 索末菲,金属电子论, ОНТИ (1938), §56]

$$\nu = \frac{a_0}{r_l}$$

金 属	Ti	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Pd	Pt	Ce	Yb
ν	2.24	2.36	2.94	3.26	3.64	3.96	2.82	2.46	3.20	5.28

由表看出：Fe, Co, Ni 的 ν 值最大，所以呈铁磁性，但 ν 值再大，交换积分的绝对值又会变小。Bethe (1938) 绘出了A值大小和符合与 ν 的关系图。



该曲线取自冯书《铁磁学》上p126 (1948)

这是一条假想曲线，反映了 v 值由小变大时， A 由负变正，经过极大又变小的过程。它可以解释一些实验事实：比如 Mn 是反铁磁性的，但 MnAl, MnBi 以及郝斯勒 (Heusler) 合金 Cu_2MnAl ，都是铁磁性的，定性地说，是由于这些合金中，Mn 原子间距变大，使交换积分 A 变正的结果。但另一些实验结果却是曲线不能解释的，比如 Fe 的居里温度并不像曲线预言的那样随压力增大而减小。

影响交换积分的因素很多，而原子间距只是影响因素之一，因此，把 A 仅看作是 v 的函数是不全面的。

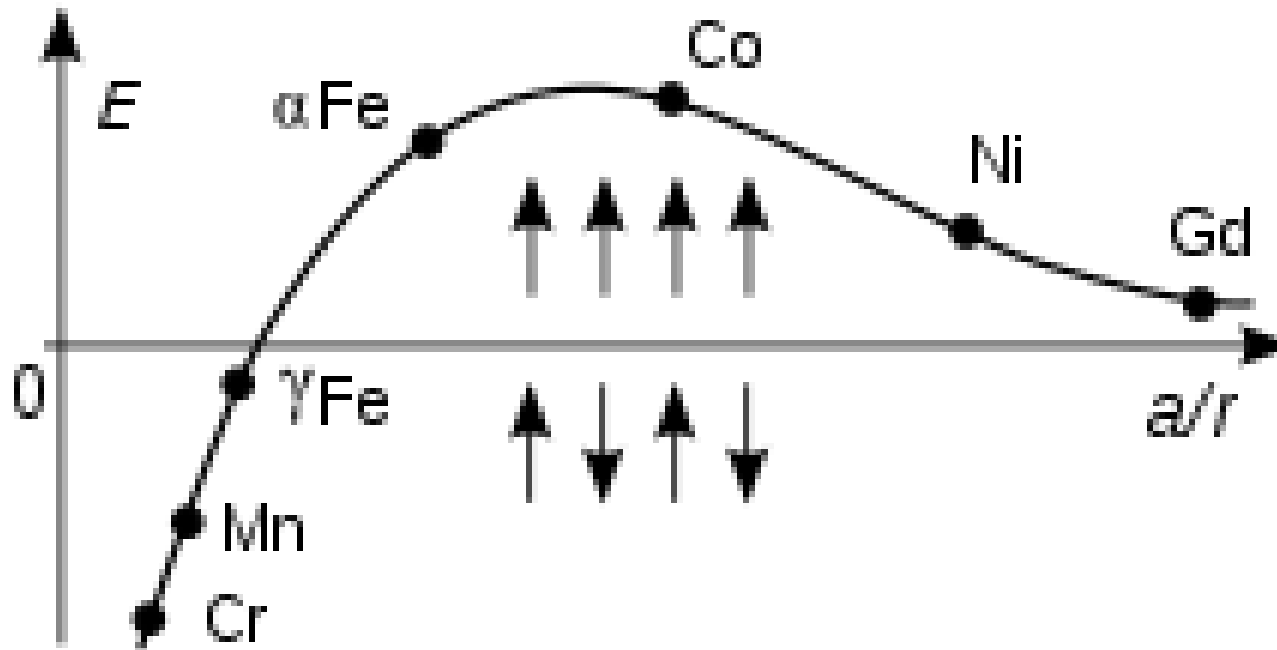
TABLE 4. INTERNUCLEAR DISTANCES ($2R$), AND DIAMETERS ($2r$) OF INCOMPLETE INNER SHELLS, OF SOME ATOMS, IN ÅNGSTROMS [SLATER, 1930]

	Atom $2R$	Inner Shell $2r$	Ratio R/r	Incomplete Inner Shell	Curie Temperature θ , °K
Mn	2.52	1.71	1.47	3d	1040 1400 630 600
Fe	2.50	1.58	1.63	3d	
Co	2.51	1.38	1.82	3d	
Ni	2.50	1.27	1.97	3d	
Cu-Mn	2.58	1.44	1.79	3d	
Mo	2.72	2.94	0.92	4d	290
Ru	2.64	2.33	1.13	4d	
Rh	2.70	2.11	1.28	4d	
Pd	2.73	1.93	1.41	4d	
Gd*	3.35	1.08	3.1	4f	
W	2.73	3.44	0.79	5d	
Os	2.71	2.72	1.02	5d	
Ir	2.70	2.47	1.09	5d	
Pt	2.77	2.25	1.23	5d	

* Calculated using Slater's formula.

注意：该表中比率定义与前不同。但数值大体上是一致的。

Bethe–Slater curve from Wikipedia, the free encyclopedia



Bethe–Slater curve: elements above the horizontal axis are ferromagnetic, below the axis are antiferromagnetic.

三. 对 Heisenberg 模型的评价

Heisenberg 模型的严格论证是1929年由Dirac 完成的，见姜书 3.3 节的介绍。

但迄今为止，还没有严格的计算证明Fe, Co, Ni的交换积分 A 有足够的量值和正确的符号能够解释它们所具有的铁磁性。事实上，斯图阿特和弗里曼曾分别计算了铁的交换积分 A 值，发现 A 值比相对于保证3d金属出现铁磁性所要求的数值小得多。后来对 Ni 的计算还表明 A 值不但数值小，甚至符号也不对。因此Heisenberg 模型不能直接用来解释过渡族金属和合金的磁性。

Heisenberg理论的主要贡献在于对自发磁化的产生给出了清晰的物理图像，对分子场的起源给出了令人满意的解释，对后来的磁学量子理论产生了重大影响。

“首先 $A < 0$ 时，会出现**反铁磁性和亚铁磁性**，进一步还可以用这个模型导出螺旋式结构及其它许多自旋结构。

此外，这个模型还可以导出**低温自旋波**，弄清二级相变，临界涨落等性质。物质磁共振理论，也是建立在局域磁距模型基础上。由此模型并考虑到磁各向异性，还可用普遍的自旋哈密顿量导出磁性物质的许多性质，既有趣又富有启发性，可以说达到了不胜枚举的程度。

从微观的角度看，能合理地应用Heisenberg模型的是**绝缘磁性化合物**，在这种情况下，承担磁性的 d 或 f 电子，由于强烈的电子关联，都被局域在各原子上，而相邻原子仅靠相互共有电子，产生反铁磁性的超交换作用，根据这种观点，Anderson建立了绝缘磁性化合物的磁性理论。此外，许多稀土金属的 $4f$ 电子也被当作局域电子看待，在其中起作用的正是将传导电子作为媒介的原子间间接交换相互作用（即RKKY相互作用）。”

摘自守谷亨：金属铁磁理论发展和现状（1984）

Magnetism observed in a gas for the first time

Is it possible for a gas to show properties similar to a magnet made of iron or nickel?

The MIT team observed the behavior in a gas of lithium atoms cooled to 150 billionth of 1 Kelvin above absolute zero.

If confirmed, the MIT result may enter the textbooks on magnetism, showing that a gas of elementary particles known as fermions does not need a crystalline structure to be ferromagnetic.



海森伯, W.K.

海森伯（1901～1976）

Heisenberg, Werner Karl

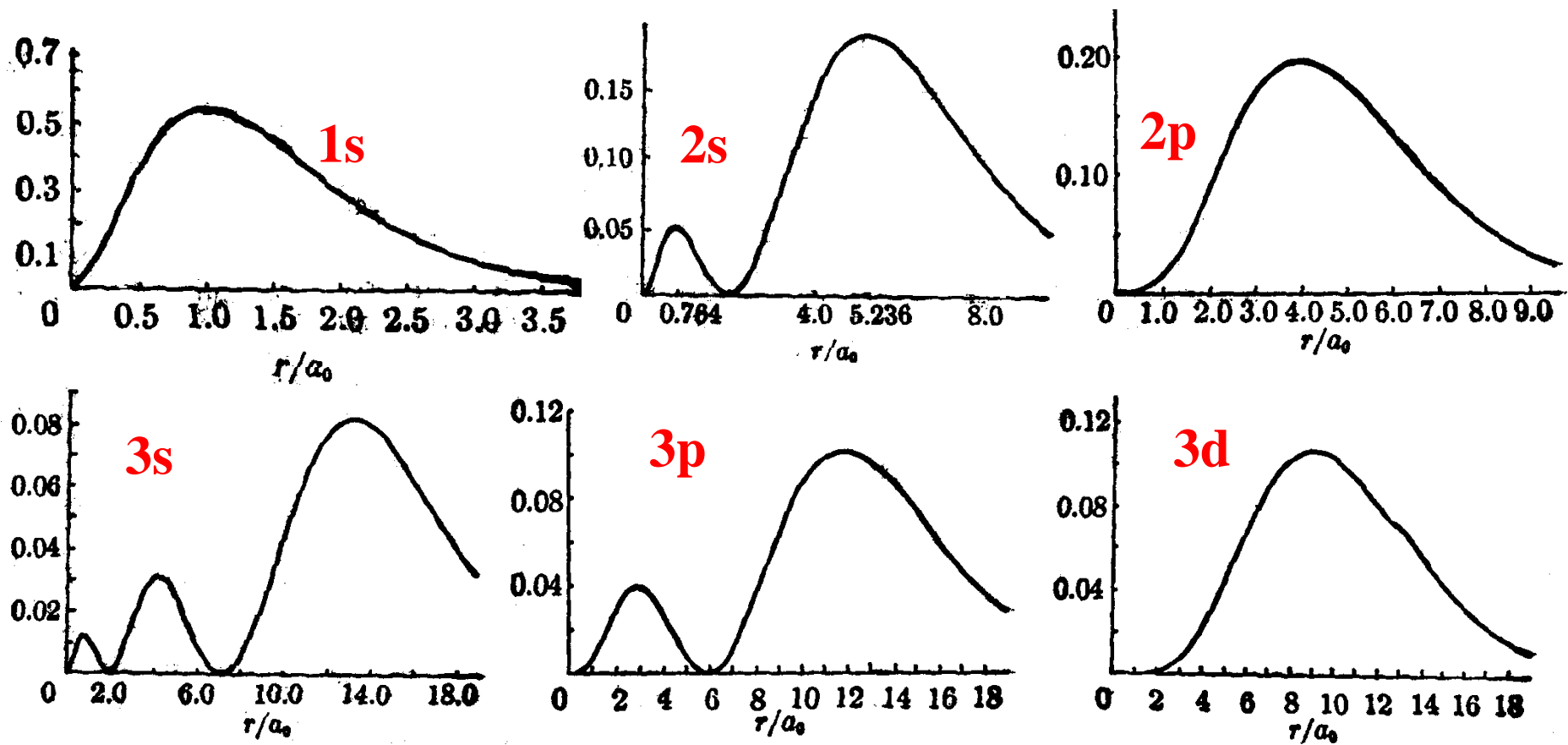
德国物理学家。1901年12月5日生于维尔兹堡，1976年2月1日卒于慕尼黑。1923年在慕尼黑大学A.索末菲的指导下获博士学位，同年赴格丁根随N.玻尔研究3年。1927～1941年任莱比锡大学教授。1942～1945年任柏林威廉物理研究所所长。第二次世界大战后任普朗克物理和天体物理研究所所长。

1924年，海森伯到哥本哈根在N.玻尔指导下研究原子的行星模型。1925年解决了非谐振子的定态能量问题，提出量子力学基本概念的新解释。矩阵力学就是M.玻恩和E.P.约旦后来又同海森伯一道在此基础上加以发展而成的。海森伯于1927年提出“不确定性”，阐明了量子力学诠释的理论局限性，对某些成对的物理变量，例如位置和动量，永远是互相影响的。虽然都可以测量，但不可能同时得出精确值。“不确定性”适用于一切宏观和微观现象，但它的有效性通常只限于微观物理学。1929年，他同W.E.泡利一道曾为量子场论的建立打下基础，首先提出基本粒子中同位旋的概念。1932年获诺贝尔物理学奖。

在第二次世界大战期间，海森伯曾和核裂变发现者之一O.哈恩一起，为纳粹发展核反应堆。他虽然不公开反对纳粹统治，但阻止原子武器的发展。战后在格丁根他和其他科学家18人发表公告，反对德意志联邦共和国政府发展核武器。著有《量子论的物理原理》、《原子核物理学》等。

海森伯，德国理论物理学家，量子力学第一种有效形式（矩阵力学）的创建者。1901年12月5日海森伯生于维尔兹堡，出身于一位教古希腊语言的中学教师家庭，从小就受到家庭在古代文学方面的熏陶。1920年中学毕业后进慕尼黑大学学习理论物理学，在索末菲（Sommerfeld）指导下学习理论物理学。1923年在那里获得哲学博士学位。然后，他到哥廷根大学深造，成为玻恩教授和希尔伯特教授的学生，备受玻恩教授赏识。据玻恩回忆：“海森伯是我所能想象的最敏锐和最有能力合作者”，“要跟上年青人，这对我一个上了年纪的人来说是很困难的”。1924年，海森伯开始在哥廷根大学讲课。两年后成为哥本哈根大学的讲师。在那里，由洛克菲勒基金发给薪水，在N.玻尔的指导下进行研究。1927年，年仅26岁的海森伯回到德国担任莱比锡大学的理论物理学教授，一直到1941年。他以后的工作除将量子力学应用于具体问题如解释许多原子和分子光谱、铁磁现象等外，总是在物理学的前沿作新探索。他同泡利一道曾为量子场论的建设打下基础。因为创立了量子力学（矩阵力学）——它导致了氢的同素异形体的发现——1932年度的诺贝尔物理学奖金于1933年授予海森伯。1941年至1945年间，他在德国柏林大学担任物理学教授兼任凯泽·威廉（Kaiser-wihelm）物理学研究所所长。1946年他再度到哥廷根大学担任物理学教授并兼任哥廷根的普朗克物理学研究所所长，一直到1958年。在此期间，1955至1956年还兼任圣安德勒斯大学革福特（Gifford）讲座讲师，1955年成为英国皇家学会会员。1958年至1970年，在德国慕尼黑担任物理学与天体物理学的普朗克研究所所长兼慕尼黑大学教授。1970年以后成为上述研究所的荣誉退休所长。1976年2月1日海森伯教授与世长辞，终年75岁。

轨道分布



氢原子核外电子的D函数分布