

海森堡——一个被误解误传的量子力学奠基人(上)

曹则贤[†]

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

2024-09-23收到

[†] email: zxcao@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20241104

CSTR: 32040.14.wl20241104

...scheint es mir eine der wichtigsten Seiten der Quantenmechanik, daß sie auf der
Korpuskularvorstellung der Materie basiert ist...
...我觉得, 量子力学之最重要的一面是, 它是基于粒子图像的...
——海森堡, 1926

摘要 海森堡是量子论和量子力学发展史上的关键人物之一。海森堡引入了半量子数, 提出了研究原子问题关注可观测量的思路, 给出了引出矩阵力学的求和规则, 基于波动力学处理多体问题提出了交换能的概念进而建立了铁磁模型, 提出了不确定性原理, 其关于原子核构造的理论引出了后来的同位旋量子数。海森堡无疑是第一流的物理学家, 有着非同寻常的物理直觉。围绕他的一些不解之谜是量子力学史的持久话题。

关键词 反常塞曼效应, 半量子数, 色散关系, 可观测量, 矩阵力学, 多体问题, 交换作用能, 铁磁性, 不确定性原理, 海森堡表示, 原子核构造

1 海森堡小传

海森堡(Werner Heisenberg, 1901—1976)出生于德国的维尔茨堡, 九岁时其父到慕尼黑大学任希腊研究教授, 海森堡随父到了慕尼黑并在那里长大和接受教育(图1)。海森堡年轻时参加过一个名为Neupfadfinder(新寻路者)的精英组织。据信“寻路(pathfinding)”在其他方面也很重要, 比如他们也试图重新发现科学(discover science anew)。海森堡把兴趣集中在远离应用的那些科学领域, 可能是因为他的同志们把物理学烙上了“mechanic materialism”的印记。Mechanic materialism这个被我们误译为机械唯物主义的概念对于理解20世界的物理学具有重要的意义, 它是一种认识到物质之下有运行原理的哲学, 此乃mechanics之真义。1920年10月海森堡想进慕尼黑大学数学系, 投奔证明了 π 是超越数的林德曼(Ferdinand von Lindemann, 1852—1939), 被拒后转投物理系的索末菲(Arnold Sommerfeld, 1868—

1951)教授。似乎索末菲也对接收海森堡不是很热心, 英文文献谓索末菲曾说过“It may be that you know something; it may be that you know nothing. We shall see.”笔者特别声明, 笔者没找到这话的原文出处。索末菲是量子论的关键人物, 其于1916年量子化了电子轨道的取向(所谓的空间量子化)。海森堡跟着索末菲这样的导师, 在我们称为“大二”的那一年其科学人生就开挂了。1921年,



图1 海森堡(1901—1976)

海森堡研究反常塞曼效应，引入了半量子数；1922年，海森堡和索末菲合作发表了两篇关于X-射线谱理论以及反常塞曼效应的论文。按照德国的教育制度，海森堡1923年为了完成大学学业去了哥廷恩大学跟着玻恩研究原子物理，给玻恩留下了深刻印象。那时候，玻恩开始了一个关于原子理论研究的雄心勃勃的计划，即探究天体力学中的扰动方法，试图通过与经典力学的类比来处理原子中的多体问题。这导致了玻恩与海森堡在氢原子理论上的合作。在玻恩那里，海森堡又结识了玻尔(Niels Bohr, 1885—1962)，从此开启了他们之间长达四十年的交往。海森堡1923年完成大学学业，获得博士学位，学位论文题目为 *Über Stabilität und Turbulenz von Flüssigkeitsströmen* (论流体的稳定性与湍流)。不幸的是，在论文答辩后的考试环节海森堡表现不佳，维恩(Wilhelm Wien, 1864—1928)教授坚持不予通过，最后还是在索末菲教授的恳求下给了个及格的评价(cum laude)。1924年，海森堡在玻恩手下通过了Habilitation，获得私俸讲师资格，直到1927年海森堡都是哥廷恩大学的讲师。1924年9月到1925年5月间，海森堡曾到哥本哈根玻尔处访问。在1926年的一段时间里，海森堡接替克拉默斯(Hans Kramers)做过玻尔的助手。

海森堡在量子论进化为量子力学的过程中做出了关键的贡献。1923—1924年玻恩讲授原子力学进而提出量子力学概念的那段时间里，海森堡是玻恩的助手之一。1924年9月，海森堡到了玻尔那里，研究辐射的量子理论。那个时期，Niels Bohr, Hans Kramers, John Slater三人提出了一个半经典理论，即所谓的BKS理论。在这段时间里，海森堡与克拉默斯之间的讨论对海森堡后来的成就帮助很大，极具量子力学史意义。1925年5月海森堡从哥本哈根回到哥廷恩，此时海森堡关于原子问题的观念发生了转变(参见海森堡1925年7月9日的信)，即他将关注的对象集中到了可观测测量上{笔者觉得这就是从力学问题转到光谱学上。电子的轨道？根本没有那回子事儿}。海森堡不再和那个电子的三维轨道(索末菲的原子模型)缠斗，而是改为处理一维非谐振子的发射问题，

结果是将量子数同可观测的辐射频率与强度拉上了关系，关于强度的计算无意中带出了矩阵乘法。玻恩看出来海森堡的这个工作的重要意义，接下来玻恩和约当发展出了矩阵力学{注意，至少到1927年量子力学指的就是矩阵力学}，给出了那个著名的共轭变量之间的非对易关系(略去了 $e^{2\pi i v_{nm}/h}$ 项的矩阵形式，且矩阵指标必须从0开始)！

海森堡1927年10月成了莱比锡大学的教授，同时期那里还有索末菲门下的他的师兄弟德拜(Peter Debye)与洪特(Friedrich Hund)。接下来的几年里，海森堡发展了铁磁模型，对原子核构造的理解为后来的粒子物理提供了一些概念基础。

2 塞曼效应

不谈论(反常)塞曼效应，是理解不了量子力学的构建过程的。索末菲及其门下的朗德(Alfred Landé, 1888—1976)、泡利、海森堡等人对理解塞曼效应做出了持续不懈的努力。现代文献中关于塞曼效应的表述，是基于量子力学所获得的原子物理表述与记号之上的(表述时有概念跳跃)，它掩盖了理解塞曼效应的艰难过程以及它在构建量子论、量子力学和原子物理过程中所扮演的角色。原子物理课本讲不清塞曼效应，情有可原。

1896年，荷兰莱顿大学的塞曼(Pieter Zeeman, 1865—1943)发现元素镉(Cadmium)的光谱线在磁场下的明显劈裂，一个单根的谱线会分裂成三根(triplet)，这个现象被命名为塞曼效应。该现象马上就被洛伦兹用他的电子理论解释了{注意，1897年才算正式发现电子}。在1897—1900期间，普莱斯通(Thomas Preston, 1860—1900)研究了强场下的辐射现象，发现了比塞曼的观察结果复杂得多的谱线劈裂行为[Thomas Preston, Radiation phenomena in a strong magnetic field, *The Scientific Transactions of the Royal Dublin Society*, 2nd series 6, 385—391(1898)]，被称为反常塞曼效应。用海森堡的话说，反常塞曼效应的分裂图像表现出了高度的规则性与规律性(große Regelmäßigkeit und Gesetzmäßigkeit der Aufspaltungsbilder im anomalen Zeemaneffekt)，因此反常塞曼效应接下来

得到了极大的关注(图2)。反常塞曼效应的解释要等待自旋概念的提出(其发生在电子的总自旋非零的跃迁上),要用到相对论和量子力学。应该反过来说,(反常)塞曼效应的研究在电子的发现、电子自旋的发现以及量子力学的建立过程扮演了非常关键的角色。

其实,大自然没有任何反常现象或反常效应,它不过是反映我们一时理解不了的现实而已。在电子自旋被发现、量子力学被发展起来以后,塞曼效应就没有必要非要分什么正常和反常塞曼效应了。原子辐射受磁场的影响,当然取决于原子自身的性质以及磁场的强度。当磁场较弱时,电子能级发生小的劈裂,表现为谱线的劈裂;而当磁场足够强时,电子的能级被极大地扰动,谱线会被重排,这归于Paschen—Back效应。

3 海森堡的量子论有关的论文

海森堡对量子论的建立以及量子力学的发展做出了许多标志性的贡献。笔者一直坚持一个观点,对一个科学家之成就的认识(我不敢说是评价)应该建立在他自己留下的白纸黑字上。据不完全统计,海森堡与量子论、量子力学有关的论文罗列如下:

(1) Werner Heisenberg, Zur Quantentheorie der Linienstruktur und der anomalen Zeemaneffekte (谱线结构的量子理论与反常塞曼效应), *Zeitschrift für Physik* **8**, 273—297 (1922).

(2) Arnold Sommerfeld, Werner Heisenberg, Bemerkungen über relativistische Röntgendoublets und Linienschärfe (关于相对论性伦琴双线以及谱线明锐度的说明), *Zeitschrift für Physik* **10**, 393—398 (1922).

(3) Arnold Sommerfeld, Werner Heisenberg, Die Intensität der Mehrfachlinien und ihre Zeeman-Komponenten (多重谱线的强度与谱线的塞曼分量), *Zeitschrift für Physik* **11**, 131—154 (1922).

(4) Max Born, Werner Heisenberg, Die Elektronenbahnen im angeregten Heliumatom (激发态氦原子中的电子轨道), *Zeitschrift für Physik* **16**, 229—

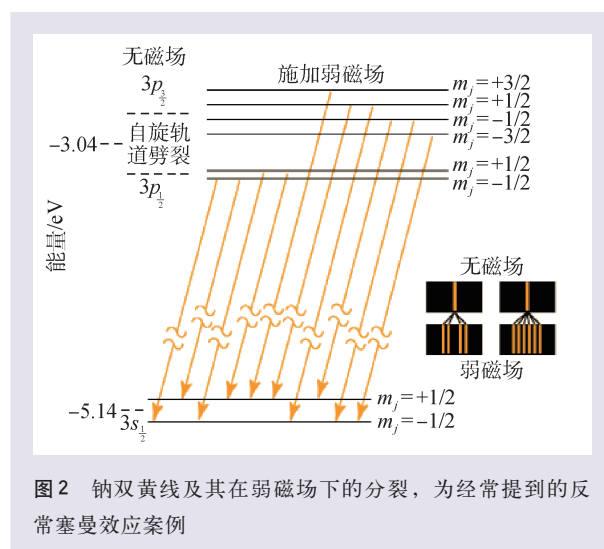


图2 钠双黄线及其在弱磁场下的分裂,为经常提到的反常塞曼效应案例

243 (1923).

(5) Max Born, Werner Heisenberg, Über Phasenbeziehungen bei den Bohrschen Modellen von Atomen und Molekeln, *Zeitschrift für Physik* **14**, 44—55 (1923). 收稿日期 1923 年 1 月 16 日。

(6) Max Born, Werner Heisenberg, Über den Einfluß der Deformierbarkeit der Ionen auf optische und chemische Konstanten I (离子形变对光学与化学常数的影响 I), *Zeitschrift für Physik* **23**, 388—410 (1924).

(7) Werner Heisenberg, Über den Einfluß der Deformierbarkeit der Ionen auf optische und chemische Konstanten II (离子形变对光学与化学常数的影响 II), *Zeitschrift für Physik* **26**, 196—204 (1924).

(8) A. Landé, Werner Heisenberg, Termstruktur der Multipletts höherer Stufe (高阶多重线的项结构), *Zeitschrift für Physik* **25**, 279—286 (1924).

(9) Max Born, Werner Heisenberg, Zur Quantentheorie der Molekeln (分子的量子论), *Annalen der Physik* **379**(9), 1—31 (1924). {有同名文章 M. Born, R. Oppenheimer, *Annalen der Physik* **389**(20), 457—484 (1927).}

(10) Werner Heisenberg, Über eine Abänderung der formalen Regeln der Quantentheorie beim Problem der anomalen Zeeman-Effekte (量子论形式规则在反常塞曼效应问题上的改进), *Zeitschrift für Physik* **26** (1), 291—307(1924).

(11) Werner Heisenberg, Über eine Anwendung des Korrespondenzprinzips auf die Frage nach der Polarisation des Fluoreszenzlichtes (对应原理在荧光极化问题上的应用), *Zeitschrift für Physik* **31**, 617—626 (1925).

(12) H. A. Kramers, Werner Heisenberg, Über die Streuung von Strahlung durch Atome (原子对光的散射), *Zeitschrift für Physik* **31**, 681—708 (1925).

(13) Werner Heisenberg, Über Stabilität und Turbulenz von Flüssigkeitsströmen (论流的稳定性与湍流), *Annalen der Physik* **379** (15), 577—627 (1924). {基于海森堡的学位论文}

(14) Werner Heisenberg, Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen (运动学的与力学的关系的量子理论再诠释), *Zeitschrift für Physik* **33**, 879—893 (1925). {1925年7月29日收稿}

(15) Max Born, Werner Heisenberg, and Pascual Jordan, Zur Quantenmechanik II (论量子力学II), *Zeitschrift für Physik* **35**, 557—615(1926). {1925年11月16日收稿}

(16) Werner Heisenberg, Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik (量子力学中的多体问题与共振), *Zeitschrift für Physik* **38** (6-7), 411—426 (1926). {收稿日期 1926年6月11日}

(17) Werner Heisenberg, Pascual Jordan, Anwendung der Quantenmechanik auf das Problem der anomalen Zeemaneffekte (量子力学在反常塞曼效应上的应用), *Zeitschrift für Physik* **37**, 263—277 (1926).

(18) Werner Heisenberg, Über die Spektren von Atomsystemen mit zwei Elektronen (两电子原子系统的光谱), *Zeitschrift für Physik* **39**, 499—518 (1926).

(19) Werner Heisenberg, Mehrkörperproblem und Resonanz in der Quantenmechanik II (量子力学中的多体问题与共振II), *Zeitschrift für Physik* **41**, 239—267 (1927).

(20) Werner Heisenberg, Schwankungserscheinungen und Quantenmechanik (涨落现象与量子力学), *Zeitschrift für Physik* **40**(7), 501—506 (1927).

(21) Werner Heisenberg, Über den anschauli-

chen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik (论量子论运动学与力学的直观内容), *Zeitschrift für Physik* **43**(3-4), 172—198(1927).

(22) Werner Heisenberg, Zur Theorie des Ferromagnetismus (铁磁性理论), *Zeitschrift für Physik* **49**(9-10), 619—636 (1928).

(23) Werner Heisenberg, Wolfgang Pauli, Zur Quantendynamik der Wellenfelder (波场的量子动力学), *Zeitschrift für Physik* **56**(1), 1—61(1929).

(24) Werner Heisenberg, Wolfgang Pauli, Zur Quantendynamik der Wellenfelder II (波场的量子动力学II), *Zeitschrift für Physik* **59**(3-4), 168—190(1930).

(25) Werner Heisenberg, Zur Theorie der Magnetostraktion und der Magnetisierungskurve (磁摩擦与磁化曲线的理论), *Zeitschrift für Physik* **69**, 287—297 (1931).

(26) Werner Heisenberg, Zum Paulischen Ausschließungsprinzip (泡利不相容原理), *Annalen der Physik* **402**(7), 888—904 (1931).

(27) Werner Heisenberg, Über den Bau der Atomkerne I (原子核结构I), *Zeitschrift für Physik* **77**(1-2), 1—11 (1932).

(28) Werner Heisenberg, Über den Bau der Atomkerne II (原子核结构II), *Zeitschrift für Physik* **78**(3-42), 156—164 (1932).

(29) Werner Heisenberg, Über den Bau der Atomkerne III (原子核结构III), *Zeitschrift für Physik* **80**(9-10), 587—596 (1933).

(30) Werner Heisenberg, Bemerkungen zur Diracschen Theorie des Positrons (关于狄拉克正电子理论的说明), *Zeitschrift für Physik* **90**(3-4), 209—231 (1934).

(31) Werner Heisenberg, H. Euler, Folgerungen aus der Diracschen Theorie des Positrons (狄拉克正电子理论的几个推论), *Zeitschrift für Physik* **98** (11-12), 714—732(1936).

关于海森堡的著述, 一言难尽。作为几乎被抬为量子力学创始人第一位的海森堡, 没有一本关于量子力学的书籍{玻恩、约当、狄拉克、泡利、朗德、薛定谔、冯·诺伊曼、外尔、维格纳这

些参与创建量子论、量子力学的人可不是这样}。海森堡冠名的带量子一词的书，有1930年出版的 *The Physical Principles of the Quantum Theory* (Dover 1930)，是Carl Eckart, F. C. Hoyt对海森堡1929年在芝加哥大学几场讲座的翻译整理，一本散文集 *Philosophical problems of quantum physics*, Woodbridge (1952)，以及一本由Jürgen Busche整理的 *Quantentheorie und Philosophie: Vorlesungen und Aufsätze* (量子论与哲学：讲座与文章)，Reclam (1979)。海森堡比较著名的著述有德语版的 *Der Teil und das Ganze: Gespräche im Umkreis der Atomphysik* (部分与整体：在原子物理圈的讲话)，DTV (1973)，是研究海森堡文笔与哲学思想的重要文献，已多次再版。此外，还有一些标着作者是海森堡其实是他人编纂的、题目里有“哲学”的著述(图3)，感觉是给他们读不懂的海森堡论文糊了一件哲学的外衣拿去糊弄人。有鉴于此，笔者以为Helmut Rechenberg (1937—2016)，海森堡最后的一个研究生，所编纂的海森堡全集题为 *The Historical Development of Quantum Theory*，是非常得体的。

如果能静下心来粗略浏览一遍海森堡的论文，或许能够对海森堡对量子论、量子力学的建立之贡献有个不至于太偏颇的认识。

矩阵力学的由来确实源自海森堡的工作，但是矩阵力学是玻恩和约当构造的 [M. Born and P. Jordan, *Zur Quantenmechanik* (论量子力学), *Zeitschrift für Physik*, **34**, 858—888 (1925)]。海森堡不知矩阵代数。就矩阵力学而言，其力学部分来自玻恩的思想，他此前即想把天体力学用于研究原子的实践，构造了原子力学(Atomphysik)，并认识到了构建量子力学的必要性，为此于1924年造了Quantenmechanik一词。所幸的是，玻恩此前因研究相对论也学了矩阵，而玻恩和约当构造矩阵力学之矩阵代数方面的工作都是约当做的。再强调一遍，约当是在希尔伯特和库朗身边学的数学，一定程度上参与了《数学物理方程I》问世的过程。当时，有能力担当构造矩阵力学这一重任的年轻人，只有约当、泡利和狄拉克，冯·诺伊曼都算是来晚了的。

4 出道即成名——半量子数

1922年，海森堡发表了他人生的第一篇论文 *Zur Quantentheorie der Linienstruktur und der anomalen Zeemaneffekte* (谱线结构的量子理论与反常塞曼效应)(图4)，论文的收稿日期为1921年12月17日。海森堡出生于1901年12月5日，也就是说投稿时可能恰好20岁。用出手不凡形容海森堡的第一篇学术文章，贴切。有研究者认为这篇文章第一次在量子论中引入了半量子数，打破了从前的量子数是整数的认知。笔者以为谱线系公式中引入1/2是自旋问题的缘起，是量子理论的一个里程碑。不过，问题可以描述得更确切些。如海森堡自己在文章中所指出那样，是朗德1921年的文章在线系公式中引入了1/2(图5)，参见Alfred Landé, *Über den anomalen Zeemaneffekt I* (论反常塞曼效应 I), *Zeitschrift für Physik* **5**(4), 231—241 (1921); *Über den anomalen Zeemaneffekt II* (论反常塞曼效应 II), *Zeitschrift für Physik* **7**, 398—405 (1921)。海森堡关于半量子数给了一个非常大胆的假设。

针对光谱中出现双线的原子，海森堡将原子分为原子核加上强烈耦合在一起的电子所组成的原子实(Atomrumpf)与一个外部电子，即价电子(Valenzelektron)。光谱记号1s对应的态，原子具有的总角动量为1(单位为 $\frac{h}{2\pi}$)。这里用的是作用量

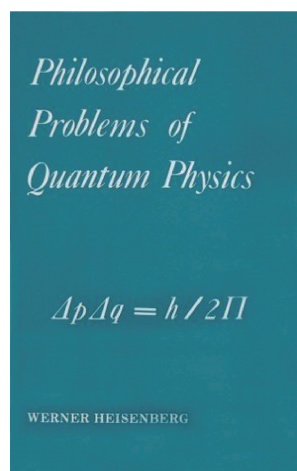


图3 1979年出版的 *Philosophical Problems of Quantum Physics*。封面上的公式 $\Delta p \Delta q = h/2\pi$ 真让人无语

**Zur Quantentheorie
der Linienstruktur und der anomalen Zeemaneffekte.**
Von **Werner Heisenberg** in München.
Mit einer Abbildung. (Eingegangen am 17. Dezember 1921.)

图4 海森堡人生第一篇论文首页截图

Während jedoch die übliche räumliche Quantelung im Magnetfelde ganzzahlige Werte für m allein zuläßt, muß man sich hier (Begründung in Teil II) mit rationalen Brüchen für m zufrieden geben, die aber wegen C. im Abstände ± 1 aufeinanderfolgen müssen. Wegen der Symmetrie von $+$ und $-$ für m kommt deshalb als einzige Folge gebrochener Zahlen die Wertereihe:

$$m = \pm \frac{1}{2}, \pm \frac{3}{2}, \dots, \pm \frac{2k-1}{2} \quad (7)$$

in Betracht, neben der anderen Wertereihe

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm k. \quad (7')$$

图5 朗德1921年的论文I。空间量子化量子数 m 被允许取有理分数

一角变量表示)。原子实与价电子互相交换角动量，可以假设平均来说两者的角动量应为 $1/2$ (der mittlere Impuls des äußeren Elektrons wie der des Rumpfes $1/2$ sei)。这意思是说，外部电子就角动量而言可类比一个(相对论的)氢原子，它是量子化的，量子数为 $1/2$ (Das äußeren Elektron ist hinsichtlich seines Impulses analog gequantelt, wie ein (relativistisches) Wasserstoffatom, jedoch mit der Quantenzahl $1/2$)。

接下来，海森堡要确立外电子的稳态轨道。第一量子条件是 $E = -\frac{Rh}{m^2}$ ，其中 m 是在线系中出现的总量子数(Gesamtquantenzahl，它确定线系的极限)；第二量子条件是 $\int_0^{2\pi} p d\beta = n^* h$ ，其中 p 是角动量，与方位角 β 是一对共轭量， n^* 是角动量子数，与线系之分蘖(记为 $s, p, d, \dots$)有关。结论是对于基轨道 ($1s$)，以及每一个 (ms)，由 $\bar{p} = \frac{1}{2}$ 可得量子数 $n^* = \frac{1}{2}$ 。假设原子实的角动量在激发态也不变。若在线系公式中出现的量子数 m 总是一个整数，那径向量子数(radiale Quantenzahle)就只能是 $(\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots)$ ，则量子数 m 的最小值总是 $n^* + \frac{1}{2}$ 。可见，量子数 m 的最小值就是常规的方向角量子数 n ，则有 $n^* = n - \frac{1}{2}$ 。这样，可得如下原子的模

型：原子实的角动量为 $\frac{1}{2}$ ，外部电子的角动量为 $n - \frac{1}{2}$ 。这两个角动量是如何相对取向的呢？再利用索末菲的空间量子化要求，得到对于双线情形的原子模型，这两个角动量要么同向，要么完全反向，即总角动量为 $n - \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = n$ 和 $n - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = n - 1$ 。海森堡由此得到一个关于双线结构之本质的假说，进而用于解释反常塞曼效应： $m^* \rightarrow m^*$ 跃迁对应谱线的 π -部分， $m^* \rightarrow m^* + 1$ 跃迁对应谱线的 σ -部分(Daß der Übergang $m^* \rightarrow m^* \pi$ -Komponenten, der Übergang $m^* \rightarrow m^* + 1 \sigma$ -Komponenten erzeugt)。

该文也讨论了三重谱线的情形，略。

海森堡的这个工作给他的导师索末菲以极大的震撼。1922年夏，索末菲写信给他较年长的学生爱泼斯坦 (Paul Epstein, 1883—1966)的信中写道：“I expect enormous achievements by Heisenberg, who I think is the most gifted one among all my pupils, including Debye and Pauli”。嗯，是同德拜和泡利并列的最有天分的学生，这得算是高度赞扬了。海森堡的原子(角动量)模型，因为牵扯到半量子数，确实不易被接受。如索末菲所言：“他的塞曼模型遭遇普遍反对，特别是玻尔……但是我发现它的巨大成功，因此我收回在其发表问题上的保守态度(His Zeeman model generally meets with opposition, particularly with Bohr…… But I find its success so enormous that I held back all my reservations with its publication)”。这段原文笔者没找到。

5 谱学研究催生量子力学

到1924年底，23岁的海森堡三年大学毕业，获得了博士学位，同论文导师索末菲合作发表了论文2篇，同导师玻恩合作发表了论文4篇，同索末菲门下师兄朗德合作发表了文章1篇，另单独署名文章3篇，这就基本确立了他一流物理学家的地位{读者请就这几句内容了解一下当年德国的教育制度与水平}。

在那篇历史性的、与矩阵力学的诞生有关的1925年论文出现之前，海森堡1924年的“量子论形式规则在反常塞曼效应问题上的改进”一文，与朗德合作的“高阶多重线的项结构”一文，以及1925年同玻尔门下的克拉默斯合作的“原子对光的散射”一文(文章是1924年1月5日自哥本哈根发出的，其中有著名的Kramers—Heisenberg色散公式)是理解海森堡的工作如何导向矩阵力学的关键。克拉默斯本人的文章，Hendrik Anthony Kramers, The Law of Dispersion and Bohr's Theory of Spectra, *Nature* **118**, 673—674(1924)，对理解色散关系等相关问题也至关重要。

先岔开个话题。杂志 *Zeitschrift für Physik* 在1924年就只在12月出版了一期，即26卷1期。这期杂志是人类学术创造浓度的顶峰，与之可相比拟的，大概只有1918年的哥廷恩大学的学报。在 *Zeitschrift für Physik* **26** (1)上，不仅有玻恩创立“量子力学”一词的文章，海森堡的两篇文章，还有玻色的、实为爱因斯坦翻译成德语的 Plancks Gesetz und Lichtquantenhypothese (普朗克分布律与光量子假说)一文(此文带出玻色统计)，W. Bothe & H. Geiger关于BKS理论的文章，费米论量子态概率的文章，W. Bothe关于光电效应的两篇文章，W. Schottky & von Issendorff关于热发射问题的文章，W. Gerlach & A. C. Cilliers关于原子磁矩的文章，J. Frenkel关于光吸收的文章，W. Gerlach关于法拉第效应的文章，Otto Hahn & Lise Meitner关于镭放射 β 射线的文章，Lise Meitner关于原子裂变放射 γ 射线的文章，E. Grüneisen & E. Goens的金属晶体研究，等等，都是影响了后续科学发展的工作，Otto Hahn & Lise Meitner的工作甚至改变了人类社会的进程。海森堡的论离子形变的文章是对此前与玻恩合作的同名文章的延续，而“量子论形式规则在反常塞曼效应问题上的改动”一文应被看作量子力学发展史上至关重要的一篇。

海森堡的“量子论形式规则在反常塞曼效应问题上的改进”一文，愚以为可看作是对玻恩构建“量子力学”计划的第一响应，文中提到Quantenmechanik名词形式4次，形容词形式两

次。玻恩的文章和海森堡的文章的杂志收稿日期相同，为1924年6月13日。文章的投稿时间应该也不会有什么差别，因为玻恩本人是主编而海森堡是他的助手。文章构思期间，海森堡在玻恩门下学习，考虑到玻恩此前讲授Atommechanik(原子力学)并出版了专著来看，Quantenmechanik一词为玻恩提出应属无疑。从海森堡的文章也用到了Quantenmechanik一词来看，玻恩就他预期应该有的Quantenmechanik这门学问而言，和海森堡是有讨论的。笔者未见科学史家注意到海森堡在同期杂志上的文章即使用了Quantenmechanik一词这个事实(图6)。

海森堡的“量子规则的改进…”一文的关键，在于指出外电子与原子实之间的耦合能量的一个值联系着两个量子数(ein Wert der Kopplungsenergie mit zwei Quantenzahlen verknüpft ist)。基于对相邻原子的谱线结构的考察(参考朗德的理论)，即一个原子的总角动量 J 会出现在下一个原子之原子实角动量的值中，其光谱中会出现原子实角动量为 $J + 1/2$, $J - 1/2$ 的两个多重谱线系。因此，可以想到耦合能可以归结于($J + 1/2$, $J - 1/2$)二者而非单单是 J 。海森堡说，这个规则与反常塞曼效应相吻合，或许能给出如何寻找

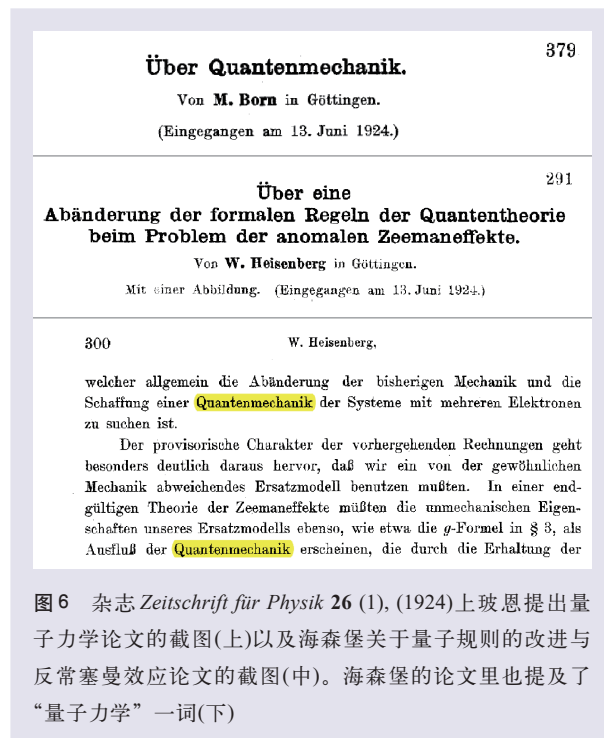


图6 杂志 *Zeitschrift für Physik* **26** (1), (1924)上玻恩提出量子力学论文的截图(上)以及海森堡关于量子规则的改进与反常塞曼效应论文的截图(中)。海森堡的论文里也提及了“量子力学”一词(下)

b) Der Zustand Q ist identisch mit P (vgl. Fig. 7). Bezeichnen wir die Frequenzen der Absorptions- und Emissionslinien im Zustande P mit ν_a und ν_e so bekommen wir:

$$\mathfrak{M}(\nu) = R \frac{1}{4h} \left\{ \sum_{R_a} \left(\frac{\mathfrak{M}_a(\mathfrak{E}\mathfrak{M}_a)}{\nu_a - \nu} + \frac{\mathfrak{M}_a(\mathfrak{E}\mathfrak{M}_a)}{\nu_a + \nu} \right) - \sum_{R_e} \left(\frac{\mathfrak{M}_e(\mathfrak{E}\mathfrak{M}_e)}{\nu_e - \nu} + \frac{\mathfrak{M}_e(\mathfrak{E}\mathfrak{M}_e)}{\nu_e + \nu} \right) \right\} e^{2\pi i \nu t} \quad (44)$$

图7 Kramers—Heisenberg 1924年文章701页上的截图，此即所谓的Kramers—Heisenberg公式

为多电子体系改进至今的力学继而一并构造出量子力学的方向 (vielleicht die Richtung angeben, in welcher allgemein die Abänderung der bisherigen Mechanik und die Schaffung einer Quantenmechanik der Systeme mit mehreren Elektronen zu suchen ist)。海森堡仅凭这句话就可以奠定他在量子力学史上的地位。

基于对氘光谱结构的分析导出了高阶多重态的结构。文中出现了 *impulslos abgeschlossene Schale* (无角动量闭合壳层) 的说法，并说到原子实中也有量子跃迁的可能，因此关于原子的构造原理不能太当真 (*das Aufbauprinzip nicht allzu eng auffassen*)。因为对氘光谱数据笔者没有任何感觉，故对这篇文章就不仔细解读了。不过，笔者想说，这篇文章是在分析帕邢的大量氘光谱数据基础上完成的。大家、天才都是干苦力的好把式——以为天才只需等着灵光一现就能功成名就的鸡贼想法可以休矣。

海森堡1924年1月与克拉默斯合作的“原子对光的散射”一文主要源于克拉默斯(此人因提出Kramers—Kronig关系以及量子场论的重整化概念而闻名)，这篇发自哥本哈根的文章拖延了13个月才发表，非常反常。这篇文章里得到了著名的Kramers—Heisenberg色散关系(图7)，其在有了波动力学以后的形式由狄拉克给出[见P. A. M. Dirac, *The Quantum Theory of the Emission and Absorption of Radiation*, *Proc. R. Soc. Lond. A.* **114** (769), 243—265(1927); *The Quantum Theory of Dispersion*, *Proc. R. Soc. Lond. A.* **114** (769), 710—728(1927)]。克拉默斯、海森堡他们指出，频率

为 ν 的光场下原子不仅以球波(Kugelwelle)形式辐射同频率的相干光，还以频率 $|\nu \pm \nu^*|$ 辐射非相干的球波，而 $h\nu^*$ 与所考察的原子的能量差有关。这篇文章重要的一点是用到了爱因斯坦的负吸收(negative Absorption)，即受激辐射的概念。

Kramers—Heisenberg色散关系为

$$M(\nu) = R \frac{1}{4h} \left\{ \sum_{R_a} \left(\frac{U_a(E\bar{U}_a)}{\nu_a - \nu} \right) + \sum_{R_a} \left(\frac{U_a(EU_a)}{\nu_a + \nu} \right) - \sum_{R_e} \left(\frac{U_e(EU_e)}{\nu_e - \nu} \right) + \sum_{R_e} \left(\frac{\bar{U}_e(EU_e)}{\nu_e + \nu} \right) \right\} e^{2\pi i \nu t},$$

读者注意到其中出现的 $\nu_e + \nu$ ， $\nu_e - \nu$ ， $\nu_a - \nu$ ， $\nu_a + \nu$ 表达即可， ν_a ， ν_e 是某状态P的吸收线与发射线的频率。

海森堡在这个工作基础上接下来往前又跨了一步，得到了玻恩与约当构造矩阵力学的出发点，即量子乘积规则。海森堡的“运动学的与力学的关系的量子理论再诠释”一文(篇幅为15页)在本系列关于矩阵力学一篇中已有叙述。这篇文章常常被当作矩阵力学的第一篇，笔者以为这对玻恩和约当非常不公平。实际上，海森堡那时不知道矩阵的概念，从白纸黑字的论文来看，矩阵力学是玻恩与约当构造的，狄拉克和泡利接着发展起来的。不把海森堡的“运动学的与力学的关系的量子理论再诠释”一文当作矩阵力学第一篇，丝毫不影响海森堡作为一个伟大物理学家的地位。基于一个人自身的工作给予其客观评价，那才是尊重。海森堡的“运动学的与力学的关系的量子理论再诠释”一文因其历史重要性，建议读者自行认真研读。网上有英文版 *On the quantum reinterpretation of kinematical and mechanical relationships*，读者请留心其中的翻译错误。另，Wikipedia的“Umdeutung paper”条目是对这篇文章的英文解读。

致谢 感谢国家自然科学基金委交叉科学部(批准号：T2241004)对“量子力学诞生百年纪念”系列前期准备工作的资助。

(未完待续)

海森堡 —— 一个被误解误传的量子力学 奠基人(下)

曹则贤[†]

(中国科学院物理研究所 北京 100190)

2024-04-19收到

[†] email: zxcao@iphy.ac.cn

DOI: 10.7693/wl20241205

CSTR: 32040.14.wl20241205

(接53卷第11期)

6 提出交换作用

海森堡1926年的“量子力学中的多体问题与共振”一文发自哥本哈根, 收稿日期为1926年6月11日, 这篇可以说是波动力学发展过程中的一个标志性的工作。奇怪的是, 就在6月8日海森堡在写给泡利的明信片上还说薛定谔的波动力学的直观图像就是“屎”。

海森堡从量子力学共振现象研究出发, 试图建立量子力学处理多体问题的基础, 结果注意到所得结果同玻色—爱因斯坦统计以及泡利禁制(即稍后的费米—狄拉克统计)之间的联系。薛定谔的波动力学是进入量子力学领域的数学舒适的新入口 (einen neuen mathematisch wesentlich bequemeren Zugang zum Gebiet der Quantenmechanik), 据此可见量子力学同多维空间中的波动光学(Wellenoptik in mehrdimensionalen Räumen)之间的形式相似{海森堡的可观测量(光学量)同薛定谔的多维空间波光学相遇了, 要不说不量子力学是辐射问题呢}。对一个 f -自由度的系统, 薛定谔把量子力学问题替换成 f -维空间里的本征值问题。薛定谔的程式(Verfahren, program)不是德布罗意意义下的物质(的)波理论的结果; 量子力学之最重要的一面是, 它是基于粒子图像的。那粒子的运动不是用我们通常的时空概念描述的。

量子力学解释原子光谱有个著名的难题, 即碱金属和氢谱中单重系与三重系之间的距离要比由两个转动电子的磁相互作用所造成的差别大数量级。海森堡要试试, 分析一下量子力学用于多

电子问题时能做的论断。结果是, 上述困难自动消解, 且可以建立起玻色—爱因斯坦计数(还有泡利禁制)同量子力学的关系。

最简单的多体问题是两个耦合的谐振子, 只要相互作用能是坐标的二次型, 就总能解耦合。此处量子论的结果总有经典的类比。两电子系统的哈密顿可写为

$$H = \frac{1}{2m} p_1^2 + \frac{m}{2} \omega^2 q_1^2 + \frac{1}{2m} p_2^2 + \frac{m}{2} \omega^2 q_2^2 + m\lambda q_1 q_2,$$

引入 $q'_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (q_1 + q_2)$, $q'_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (q_1 - q_2)$ {为了

更好地理解固体物理, 笔者以为这个变换最好写成 $q'_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (q_1 + e^{i0} q_2)$, $q'_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (q_1 + e^{i\pi} q_2)$ 。记住, 多体问题只有加号! }, 哈密顿量变为

$$H = \frac{1}{2m} p_1'^2 + \frac{m}{2} \omega_1'^2 q_1'^2 + \frac{1}{2m} p_2'^2 + \frac{m}{2} \omega_2'^2 q_2'^2,$$

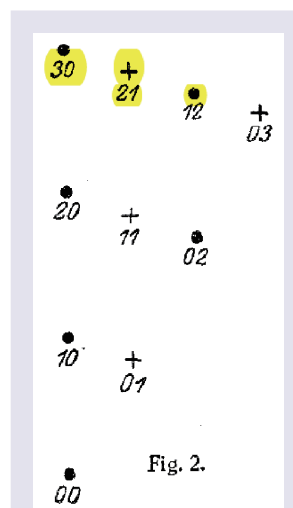


图8 海森堡原文中的图2。 $n_1' n_2'$ 表示构成的项系统分成了两套子系统

其中 $\omega_1'^2 = \omega^2 + \lambda$, $\omega_1'^2 = \omega^2 - \lambda$. 稳态能量为

$$H_{n_1', n_2'} = \frac{h\omega_1'}{2\pi} \left(n_1' + \frac{1}{2} \right) + \frac{h\omega_2'}{2\pi} \left(n_2' + \frac{1}{2} \right).$$

记(光谱)项为符号 $n_1' n_2'$, 对于固定的 $n_1' + n_2'$ 值, $n_1' n_2'$ 的各种组合可以按照 n_1' 从大到小交替赋予“■”和“+”。举例来说, $n_1' + n_2' = 3$, 则对于 $n_1' n_2'$ 的组合 30, 21, 12, 03 可以交替地赋予标记“■”和“+”。假设两电子是在一条直线上相对一个带电荷的点振动, 则电偶极矩实质上只由 $q_1 + q_2$ 表示。假设发光是电偶极矩造成的, 不考虑高阶矩的作用, 则跃迁只发生在 n_1' 改变 1 的项之间(图 8)。这样, $n_1' n_2'$ 标记的项系统(Termsysteme)就分成了两个子系统, “■”和“+”, 组合(即跃迁)只发生在“■”系统或“+”系统内, 而交互组合则不可能出现。

若假设振子具有原初的相同性{后来的物理文献称为全同性}, 则因为在量子力学处理中交互组合的缺失就出现了一种特征的不确定性(Unbestimmtheit), 即大自然实现了两个项系统, 还是只是其中之一? 因为不管是系统“■”还是系统“+”, 或者两者的组合, 都构成对问题的量子力学解。海森堡指出, 在我看来这个量子解的 Unbestimmtheit 是最具有实质意义的结果。它提供了足够的自由, 使得玻色—爱因斯坦计数的要求以及泡利的等价轨道禁制都可以丝滑地加入量子力学系统。

海森堡最为人推崇的是他的直觉, 在这篇文章里表现得淋漓尽致。海森堡写道: “结果是, 人们把一个其测度同欧几里得空间严重偏离的空间当成了普通空间(es sei denn, man rechnet einen Raum, dessen Maßbestimmung von der Euklidischen wesentlich abweicht, zu den “gewöhnlichen” Räumen)”。这个海森堡注意到的空间后来被冯·诺伊

曼发展成为希尔伯特空间。又, “于是, 因为在此问题的量子力学处理中缺少了交互组合, 从而浮现了一种特征的不确定性(Dann tritt wegen jenes Mangels an Interkombination in der quantenmechanischen Behandlung des Problems eine charakteristische Unbestimmtheit auf)”, 对的, 1927 年他接着阐释这个本文提及三次的 Unbestimmtheit, 就成了今天人们念念不忘的“不确定性原理”。又, “…泡利禁制与爱因斯坦统计有相同的起源, 且与量子力学不矛盾(…daß Paulis Verbot und die Einsteinsche Statistik den Gleichen Ursprung haben, und daß sie der Quantenmechanik nicht widersprechen)”, 这就是后来证明了的量子统计与自旋的关系; “…为了算出多电子原子的谱, 我们可能无需解决这些困难(…daß wir wahrscheinlich diese Schwierigkeiten nicht zu lösen brauchen, um die Spektren der Atom emit mehreren Elektronen auszurechnen)”, 嗯, 后来维格纳和外尔把群论引入量子力学, 证明了海森堡的这个观点。

在这篇文章中, 海森堡是明确地把量子论和量子力学作为不同的两个概念提及的(图 9), 后世的人们常常把这两个概念混为一体。这篇文章的重点是提出了交换作用。交换作用(exchange interaction)是导致铁磁性的主要物理效应, 没有经典对应。狄拉克也独立发现了交换作用, 但是稍晚些(P. A. M. Dirac, On the Theory of Quantum Mechanics, *Proceedings of the Royal Society A* **112** (762), 661—677 (1926-10-01). 收稿日期为 1926 年 8 月 26 日)。

此文还有第二部分, 收稿时间为 1926 年 12 月 22 日。不再赘述。

7 不确定性的困惑

所谓的不确定性原理几乎被当成了海森堡最伟大的成就, 它是许多严肃量子力学问题论证的基础, 也是许多人特别热心的关于量子力学的闲扯皮。1995 年, 当笔者终于完成了博士学位论文有点闲暇时, 便决定认真研读海森堡 1927 年的这篇“论量子论运动学与力学的直观内容”, 顿时

die später zur Erklärung der Spektren benötigt werden. Das Oszillatorbeispiel hat noch den weiteren Vorteil, daß kaum Unterschiede zwischen der Behandlung nach der klassischen Theorie, der bisherigen Quantentheorie und der Quantenmechanik bestehen; zu jedem quantentheoretischen Resultat gibt es hier ein einfaches klassisch-mechanisches Analogon.

图 9 海森堡多体问题论文 p.414 上的截图。量子论和量子力学是并列的两个概念

疑窦丛生。及至读了 Max Jammer 的 *The philosophy of quantum mechanics* (John Wiley & Sons, 1974), 读到了其中给出的诸多当时就出现的严肃推导, 才确认其中的荒唐, 最终写了名为“Uncertainty of the uncertainty principle”的长文(物理学咬文嚼字 044)。海森堡这篇文章的影响极大, 至迟在 1929 年就有了英文 uncertainty principle 的说法。

其实, 海森堡此文不过是在强调在量子力学(指玻恩、约当的矩阵力学)中非对易关系式 $pq - qp = \frac{h}{2\pi i}$ 所带来的特殊性。如果我们注意到经典力学中并非没有非对易代数, 而是还有 $[L_i, L_j] = 2c_{ij}^k L_k$ 这样的非对易关系, 而量子力学对其也是直接照搬的(用约当的关系 $p = -i\hbar\partial$ 改造了一下), 就不会莫名惊诧了{笔者瞎想, 强调量子力学所用代数同经典力学所用代数之同一也许比强调不同更有意义}。 $[L_i, L_j] = 2c_{ij}^k L_k$ 这种非对易关系及其表示, 比如用泡利矩阵, 相关知识早在 60 年前就准备好了。此处先简短述说几句关于不确定性原理的不恰当处。

(1) 定义算符方差为 $\Delta A^2 = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2$, 则由 Schwarz 不等式, 有

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \frac{1}{4} \langle [A, B] \rangle^2 + \frac{1}{4} \langle \{A - \langle A \rangle, B - \langle B \rangle\} \rangle^2,$$
 其中 $[A, B] = AB - BA$, $\{A, B\} = AB + BA$. 忽略右侧第二项, 得

$$\Delta A^2 \Delta B^2 \geq \frac{1}{4} \langle [A, B] \rangle^2.$$

稍微对数学严谨性有一丁点儿敬畏心的人都知道, 这么做了以后, 那个“ $\geq$ ”中的“ $=$ ”可能就没有成立的机会了(参见 Max Jammer 之 *The indeterminacy relation* 一章)。以坐标和动量算符 q, p 为例, $[q, p] = i\hbar$, 有 $\Delta q \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$ 。再进一步地把那个“ $\geq$ ”仅当作“ $=$ ”处理, 就有了所谓的 $\Delta q \Delta p \sim \frac{\hbar}{2}$ 或者 $\Delta q \Delta p \sim \hbar$, 就可以满嘴跑火车怪力乱神了, 比如什么位置测量越准确, 则同时动量测量就越不准确。稍微对数学严谨性有一丁点儿敬畏心的人都知道, 如果是 $\Delta q \Delta p > \frac{\hbar}{2}$ 这样的关系,

根本就不存在一者变大则一者必然变小的事儿。

(2) 还是拿严格可解的量子力学问题来验证一下吧。比如, 无限深方势阱, 或者谐振子问题, 这两个问题是严格可解的, 波函数都是已知的。可以计算一下不同本征态下 $\Delta q, \Delta p$ 的值, 人们会发现, $\Delta q, \Delta p$ 是同步变化的{参见刘家福, 张昌芳, 曹则贤, 一维无限深势阱中粒子的位置—动量不确定性关系: 基于计算的讨论, 物理 38, 491—494(2010)}! 一个粒子, 其位置不确定度的增加必然伴随动量不确定度的增加, 反之亦然。趾高气昂的富人就是比畏畏缩缩的穷人难以把握行踪。

海森堡这篇文章中, 大多时候 Quantenmechanik 是指矩阵力学, 以示同薛定谔理论的区别。这篇 27 页的论文不好读, 海森堡在讨论不确定性问题时牵扯了三个不同的概念, 即 Unbestimmtheit (不确定性), Ungenauigkeit (不准确), Unsicherheit (拿不准, 说不好, 见于 Unsicherheitsrelation, 拿不准关系)。理论论证用的是 Dirac—Jordan 的变换理论; 在(想象)实验论证方面, 海森堡则提及了 Γ -显微镜, 外加康普顿效应, Ramsauer 效应, 光电效应, 多普勒效应, Stern—Gerlach 实验, Franck—Hertz 实验, Woods 实验, 等等, 这对于一个理论物理学家来说挑战不小{那些讨论海森堡不确定关系的文章基本不提这些内容}, 你可以想象这里面包含着多少细节上的、原理上的不恰当, 以至于此文章的最后两页是根据玻尔建议而来的补充说明。不妨指出一个概念上的漏洞为例。海森堡论证时的一个技巧是把范围 $[x, x + \Delta x]$ 里的 Δ 混淆为理论意义上的方差(比如作为高斯函数型概率函数里的参数), 他这么做可能是维恩因他不熟悉显微镜的物理而拒绝让他博士答辩考试通过(一点都不过分)所造成的伤害太大了。也是在不久前的 1926 年底, 在薛定谔报告波动力学时, 主持人维恩对作为听众的海森堡的态度再度对他造成了伤害。

然而, 必须指出, 海森堡的这篇论文是有很多闪光思想的, 对后来的量子力学发展具有指导性意义, 但一般英文教科书或物理学史研究却鲜有提及。兹略举几例如下:

(1) 用通常的运动学和力学的概念诠释量子力学是绝无可能的 (…eine Deutung der Quantenmechanik mit den gewohnten kinematischen und mechanischen Begriffen jedenfalls nicht möglich ist)。

(2) 关系 $p_1 q_1 \sim h$, 其中 p_1, q_1 分别是动量与位置的测量方差, 是对相空间分割成各单元大小为 h 此一事实的确切表达。

(3) 依据玻恩与约当, 量子论有统计特征 (…einen charakteristisch statistischen Zug der Quantentheorie); 依据狄拉克, 此统计是实验带进去的 (die Statistik durch unsere Experimente hereingebracht sei)。

(4) 量子论与相对论好有一比。如果同时性 (Gleichzeitigkeit) 是 “明锐的 (scharf)”, 即信号速度无穷大, 相对论是不可能的; 若有实验可同时 (gleichzeitig) 给出 “明锐的” p 和 q , 则量子力学是不可能的 (so wäre die Quantenmechanik unmöglich)。不精确性 (Ungenauigkeit) $p_1 q_1 \sim h$ 使得方程 $pq - qp = \frac{h}{2\pi i}$ 成立而不改变 p, q 的物理意义。

(5) 此中我们可以瞥见薛定谔方程线性之深意; 因此我们只能将之视作相空间波的方程, 因此我们认为任何尝试将此方程, 比如在相对论情形 (多电子情形), 用非线性方程替代, 是无望的 (Darin erblicken wir den tiefen Sinn der Linearität der Schrödingerschen Gleichungen; deswegen können sie nur als Gleichungen für Wellen im Phasenraum verstanden werden und deswegen möchten wir jeden Versuch, diese Gleichungen z.B. im relativistischen Falle (bei mehreren Elektronen) durch nichtlineare zu ersetzen, für aussichtslos halten)。

(6) 每一个量子论的量或者矩阵都允许赋予一个数, 或者说是它的 “值”, 且连同一个确切的概率误差。概率误差依赖于坐标系 {注: 即后来的本征函数集}; 任一量子论的量总存在一个该量的概率误差为零的坐标系 (注: 即该量的本征函数集可用于系统的表述) (Jeder quantentheoretischen Größe oder Matrix läßt sich eine Zahl, die ihren

“Wert” angibt, mit einem bestimmten wahrscheinlichen Fehler zuordnen; der wahrscheinliche Fehler hängt vom Koordinatensystem ab; für jede quantentheoretische Größe gibt es je ein Koordinatensystem, in dem der wahrscheinliche Fehler für diese Größe verschwindet)。

(7) 只要承认量子论的量 “在现实中” 是矩阵, 则可以无碍地得到定量规律 (Sobald man zugibt, daß alle quantentheoretischen Größen, “in Wirklichkeit” Matrizen seien, folgen die quantitativen Gesetze ohne Schwierigkeiten)。

海森堡的这个工作应该是玻恩—约当 1925 年工作的延续。在 1925 年的文章中, 玻恩与约当把 $pq - qp = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{1}$ 称为 “锐化的量子条件” (die wir die “verschärfte Quantenbedingung” nennen), 英译为 the sharpened quantum condition。这个 verschärfte 一词, 我猜, 启发到了海森堡, 因为不确定性关系就是在谈论可观测量 unscharf (不明锐的) 问题。如果我们知道所谓光谱或者轨道记号里的 s -都来自这个形容词 scharf, 就能理解为什么他们能迅速把光谱特征、轨道记号、不确定性原理联系到一起了。

8 质子与中子的同一性

海森堡 1932 年的关于原子核构造的论文, 是他强大的直觉的又一证据 {仅有直觉是不够的, 比如海森堡就非常熟悉实验结果。海森堡的超凡能力不是一句直觉强大能说清楚的。有些理论物理学家一辈子也不能理解一个实验事实, 而有些实验物理学家一辈子也不知道自己在干什么。物理是用公式描述的, 是用事实支撑的}。海森堡要讨论一个特别的假设, 即原子核可由质子和中子在没有电子参与下构成 (die Atomkerne aus Protonen und Neutronen ohne Mitwirkung von Elektronen aufgebaut seien), 启发来自 He 原子核那超乎寻常的稳定性 {它竟然能从原子核里自发地释出, 此情景下其名为 α -粒子}。中子是独立的粒子, 而非由质子和电子复合而成。自然可想到, 中子可分裂为

质子和电子{因为 $0 = 1 + \bar{1}$ }，根据玻尔的观点，此过程中能量与动量守恒可能不成立 (wobei vermutlich die Erhaltungssätze für Energie und Impuls nicht mehr anwendbar sind)。

海森堡假设中子遵从费米统计，自旋为 $1/2$ 。然后基于 H_2^+ 离子(其和 H_e^+ 的异同称得上一本专著)的类比，加上此前他发展出的位置交换(Platzwechsel)理论，海森堡尝试写出原子核的哈密顿量。海森堡认为，原子核中的每个粒子由 5 个参数表征，3 个位置坐标，自旋 z -分量 σ^z ，以及一个身份标签 ρ^z 。 $\rho^z = +1$ 表示中子， $\rho^z = -1$ 表示质子。重要的是，哈密顿量中因为位置交换应有描述 $\rho^z = +1$ ， $\rho^z = -1$ 之间的跃迁元素，故而应纳入矩阵：

$$\rho^z = \begin{vmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{vmatrix}, \quad \rho^n = \begin{vmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{vmatrix}, \quad \rho^z = \begin{vmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{vmatrix}.$$

{字儿，笔者是看懂了，但是此处论证的逻辑链笔者没悟出来。仅仅只是从 1927 年的泡利方程得到的灵感吗？不过，似乎杨—米尔斯场的影子这儿是已经有了}。由此海森堡写出了：

$$H = \frac{1}{2M} \sum_k p_k^2 - \frac{1}{2} \sum_{k>l} J(r_{kl}) (\rho_k^z \rho_l^z + \rho_k^n \rho_l^n) - \frac{1}{4} \sum_{k>l} K(r_{kl}) (1 + \rho_k^z)(1 + \rho_l^z) + \frac{1}{4} \sum_{k>l} \frac{e^2}{r_{kl}} (1 - \rho_k^z)(1 - \rho_l^z) - \frac{D}{2} \sum_k K(r_{kl}) (1 + \rho_k^z).$$

上式右侧第一项是动能项，第四项是库仑作用项，第五项是为质子质量略小于中子而引入的质量补偿，都比较直观好理解。第二项中的 $J(r)$ ，海森堡说它是互换(Austausch-)或者说是位置交换积分(Platzwechselintegral)，由 H_2^+ 的分子理论类比而来{笔者不熟}，不过不妨就看作是中子—质子对的一个基本性质(eine fundamentale Eigenschaft des Paares Neutron und Proton anzusehen)。类似地，第三项中的 $-K(r)$ 是两中子间的交换作用，其导致中子间的吸引。

这个模型对不对的另说，您就说海森堡这构造物理的能力强不强吧！

海森堡接下来讨论奇数和偶数个中子的原子核的稳定性， γ -射线被原子核的散射，中子性质

等问题。他注意到了中子的一些行为无法用量子力学描述。限于篇幅，不多赘述。

基于海森堡 1932 年的质子—中子结合的原子核模型，维格纳(Engene Wigner, 1902—1995)于 1937 年提出了同位旋的概念[E. Wigner, On the Consequences of the Symmetry of the Nuclear Hamiltonian on the Spectroscopy of Nuclei, *Physical Review* **51**(2), 106—119(1937)]，此为第一个与时空对称性无关的“internal”量子数。此是后话，不多赘述。

9 多余的话

海森堡一直被传为是量子力学(特指矩阵力学)的创立者，始作俑者恰是玻恩本人。在玻恩、约当 1925 年的创立矩阵力学一文的摘要中，他们写道：“不久前由海森堡所给出的预设将(首先针对一个自由度的体系)发展为量子力学的系统理论[Die kürzlich von Heisenberg gegebenen Ansätze werden (zunächst für Systeme von einem Freiheitsgrad) zu einer systematischen Theorie der Quantenmechanik entwickelt]”。正文的第一句为“此杂志不久前所发表的海森堡所给出的、符合量子论要求的指向新的运动学与力学的预设，在我们看来具有深远的影响 (Die kürzlich von Heisenberg in dieser Zeitschrift mitgeteilten Ansätze zu einer neuen Kinematik und Mechanik, die den Grundforderungen der Quantentheorie entsprechen, scheinen uns von großer Tragweite zu sein)”。在玻恩、海森堡和约当三人署名的论文中，摘要的第一句为“本文第一部分中基于海森堡预设所发展出的量子力学将被推广至多自由度的体系 (Die aus Heisenbergs Ansätzen in Teil I dieser Arbeit entwickelte Quantenmechanik wird auf Systeme von beliebig vielen Freiheitsgraden ausgedehnt)”。作为对海森堡 1924/1925 年工作的肯定，应该说这几句是忠于事实的，也反映玻恩作为前辈物理学家、导师的优秀品格。玻恩在其他书籍中也会说 Heisenbergs Quantenmechanik (海森堡的量子力学)，玻恩抬高了海森堡属于作茧自缚，不能(都)怪别人。

当玻恩—约当创立矩阵力学时，海森堡并不知道什么是矩阵。海森堡自己是承认这一点的。At that time I must confess I did not know what a matrix was and did not know the rules of matrix multiplication [见 W. Heisenberg, Development of concepts in the history of quantum theory, *Am. J. Phys.* **43**, 389—394 (1975)]。海森堡 1925 年一人署名的那篇文章是经由玻恩整理成文且由后者送出发表的(玻恩曾言道: After having sent Heisenberg's paper to the *Zeitschrift für Physik* for publication...), 根据他们当时的身份关系这是非常正常的。

至于有人造出了“矩阵力学三部曲”的说法，并把海森堡 1925 年的文章封为矩阵力学之第一篇，源头可能在薛定谔。玻恩文章中的写法，到 1926 年薛定谔的论文里就变味了。薛定谔 1926 年的论文 *Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen* (论海森堡—玻恩—约当之量子力学与鄙人的量子力学之间的关系)，题目算是把矩阵力学给判定为“海森堡—玻恩—约当的量子力学”了。由于随后的量子力学简直等同于薛定谔的波动力学，薛定谔的这个说法是致命的。其开篇第一句更是把量子力学归于海森堡一人，谓“一方面是海森堡的量子力学，一方面是此处刚表述了其特征的、被当作“波动的”或者“物理的”力学，两者在出发点与表示范围上的截然不同…(Bei der außerordentlichen Verschiedenheit der Ausgangspunkte und Vorstellungskreise der **Heisenbergschen Quantenmechanik** einerseits und der neulich hier in ihren Grundzügen dargelegten und als “undulatorische” oder , “physikalische” Mechanik bezeichneten Theorie anderseits...)”。薛定谔显然也知道这样表述是不合适的，故他在 Heisenbergschen Quantenmechanik 一词处加了一个脚注，先是给出了所谓“矩阵力学三部曲”所指的那三篇论文的出处，然后写道：“接下来，为了简短起见，我将三篇文章的作者名就用海森堡的名字代替，将后两篇文章称为‘量子力学 I, II’ (Ich erlaube mir im folgenden der Kürze halber die drei Autornamen im allgemeinen durch den Heisenbergs zu ersetzen und

zitiere die zwei letztgenannten Abhandlungen mit ‘Quantenmechanik I u. II’)”。薛定谔当时是真不知道他的波动力学会被当作量子力学(之全部)，不知道自己后来的影响力之大以及一般学者做学问是怎样地不走心，他的一个“为了简短起见 (der Kürze halber)”轻松地歪曲了量子力学历史。到了后来的一些量子力学研究者或者教师那里，量子力学(矩阵力学)真就被当成是海森堡的创造了。比如，有人随手写道：“在玻恩和约当的帮助下，海森堡想到了一种矩阵理论…(Heisenberg, with help from Max Born and Pascual Jordan, came up with a matrix theory …)”，这是典型的信口开河。三人成虎，不服不行。

玻恩的谦虚害了他自己和约当。当 1932 年诺奖委员会以“for the creation of quantum mechanics”的理由授予海森堡诺贝尔奖时，有人评价这个理由是“summed up Heisenberg's merits in a nutshell”，这个“一言以蔽之”式的理由简直就是对玻恩创立量子力学之成就的干脆抹煞。玻恩对他当年文章中不经意的说法所造成的后果，显然是后悔了的。在玻恩的 *My Life: Recollections of a Nobel Laureate* (Taylor & Francis, 1978) 一书 218—219 页上，玻恩写道“This paper by Jordan and myself contains the formulation of matrix mechanics, the first printed statement of the commutation law, some simple applications to the harmonic and anharmonic oscillator, and another fundamental idea: the quantization of the electromagnetic field by regarding the components as matrices. Nowadays, textbooks speak without exception of Heisenberg's matrices, Heisenberg's commutation law and Dirac's field quantization.”是的，提起矩阵力学，人们会说起海森堡的矩阵，海森堡的交换律，至于学问的真实来历甚至真实含义是什么，who cares? 量子力学很了不起吗，又不是非要懂量子力学才能成为量子物理学家。

海森堡个人对量子力学的态度是非常有趣的。矩阵力学是玻恩—约当构造的(由狄拉克和泡利发展的)，其中的数学不为海森堡所知，但他对矩阵力学是他所创造的说法似乎不反感。波动力学

是薛定谔构造的，他说薛定谔波动力学的直观意义是屎。当玻姆(David Bohm, 1917—1992)提出导波理论(pilot wave theory)时，海森堡又给它贴上了“a superfluous ideological superstructure (浮夸的思想上层建筑)”的标签。

海森堡对薛定谔波动力学的反应不好理解。在他自己的论文里，海森堡是把波动力学作为量子力学(即矩阵力学)的对照物的。在狄拉克的传记 *The Strangest Man* 一书中提到了这么一件事，1926年5月海森堡在给狄拉克的信中督促狄拉克严肃对待薛定谔的理论[Graham Farmelo, *The Strangest Man—The Hidden Life of Paul Dirac, Mystic of the Atom*, Basic Books (2009)]。实际上，他本人也确实是对薛定谔的理论的。然而，在当年6月8日给泡利的信中，海森堡写道：“薛定谔关于他的理论之直观性所写的，‘不可作有意义的东西看…’。换句话说，我觉得就是屎。薛定谔理论的最大功用就是计算矩阵元(Was Schrödinger über Anschaulichkeit seiner Theorie schreibt, “dürfte wohl keinem sinngemässe…” In a. W. ich finde es Mist. Die große Leistung der Schröd. Theorie ist die Berechnung der Matritzenlemente)”。

海森堡是个幸运儿，一些重要的成果都安到了他的头上，比如所谓的海森堡运动方程与海森堡图像或者表示(Heisenberg picture, Heisenberg representation)。

在海森堡表示中，算符 A_H 依赖于时间，而波函数 ψ_H 不依赖于时间，其同薛定谔表示之间的变换关系为 $A_H(t) = e^{iHt/\hbar} A_{Sch} e^{-iHt/\hbar}$ ， $\psi_H = e^{iHt/\hbar} \psi_{Sch}(t)$ 。算符满足运动方程 $i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_H(t) = A_{Sch} H - H A_{Sch}$ 。有人随口就说“the Heisenberg picture or Heisenberg representation is a formulation (largely due to Werner Heisenberg in 1925) of quantum mechanics”，罔顾这个问题里涉及的波函数是1926年才有的概念，而其中的变换是狄拉克和约当1926年独立发展出来的事实。运动方程的矩阵形式是狄拉克1925年得到的，但这个方程被称为海森堡方程。

最不可思议的是，海森堡1955年竟然抛出了

“量子力学哥本哈根诠释”的说法。彼时玻恩、玻尔、薛定谔、约当、泡利、狄拉克这些人都还健在。海森堡的这个“哥本哈根诠释”的发明是第二次世界大战后的一个谜(the image of a unitary Copenhagen interpretation is a post-war myth, invented by Heisenberg)。量子力学的波动力学形式来自在苏黎世的奥地利人薛定谔，而量子力学一词、量子力学的矩阵形式以及关于量子力学的波函数或者波函数模平方的多种诠释则来自德国哥廷恩{笔者最信服来自剑桥的狄拉克的波函数诠释}。不妨说，量子力学不可能出自哥廷恩之外的任何地方。即便说量子力学(特指矩阵力学)是海森堡创造的，也是海森堡在哥廷恩期间创造的。然而，更更更不可思议的是，“量子力学哥本哈根诠释”的说法竟然有人信了，还被写入了某些量子力学教科书，这些人竟然不去关注这个说法的依据是什么、原始文献在哪里。注意到量子力学的诞生与发展在两次世界大战之间，后期还伴随着物理工作语言从德语向英语的转移，这里可能有很多困惑产生的具体原因。

第一个量子力学形式的矩阵力学所响应的是海森堡的求和规则，对海森堡的这个贡献如何评价都不过分。海森堡在1925年之前对量子论的贡献，1925年后对量子力学发展的贡献，都可圈可点，但至少海森堡没有关于量子力学的著述也是事实。认识到这个世界上应该有“量子力学”这种学问是玻恩在1923年前后完成的，并且是玻恩在1924年造了量子力学这个词。就认识到量子力学的存在以及造了量子力学这个词而言，玻恩对量子力学的贡献与其后所有的对量子力学的贡献，包括他本人的，都应该分而论之。

必须说，海森堡身上的一些不解之谜(controversy, myth)，基本不是海森堡造成的。后续的量子力学研究者与传播者不明就里、不肯溯源却信口开河的做派难辞其咎。此外，量子力学之玻恩—约当—海森堡—泡利—狄拉克部分都是很难懂的。如果不是因为薛定谔方程可以简单地退化为独立于物理的二阶微分方程，估计人们也懒得理会薛定谔的理论。举例来说，那个对建立波动力学至关重要的薛定谔1925年论文就几

乎不会被提起。狄拉克之所以被经常提起，可能是沾了相对论的光，他的相对论量子力学方程，除了几个在这个方向上工作的研究者，才没人愿意理会呢。不信，你问问量子力学老师，薛定谔波函数的 ψ^* 同狄拉克波函数的 $\bar{\psi}$ 之间的不同是什么？

历史真相的细节不重要，但是学问的细节本身却很重要。当我们真心学会了一门学问，则历

史的真实细节便也会为我们所熟知。历史的真相可以被遗漏，甚至故意掩盖、扭曲，但学术的逻辑自己会诉说。这是科学史独特的地方，当然这里的科学权且仅限于数学和物理。

致谢 感谢国家自然科学基金委交叉科学部(批准号: T2241004)对“量子力学诞生百年纪念”系列前期准备工作的资助。

参考文献

- [1] Blum W *et al* (ed.). Werner Heisenberg, Gesammelte Werke, Serie A, Wissenschaftliche Originalarbeiten (海森堡全集 A: 学术原文). Springer, 1985
- [2] Cassidy D C (ed.). Werner Heisenberg: A bibliography of his writings (来自互联网)
- [3] Eckert M. Werner Heisenberg: controversial scientist. *Physics-world*, 30 Nov., 2001
- [4] Arabatzis T. The Zeeman effect and the discovery of the electron. In: Buchwald J Z, Warwick A (ed.). *Histories of the electron: the birth of microphysics*. The MIT Press, 2001
- [5] Barut A O, van der Merwe A (ed.). *Selected Scientific Papers of Alfred Landé*. D. Reidel, 1988
- [6] Farmelo G. *The Strangest Man—The Hidden Life of Paul Dirac, Mystic of the Atom*. Basic Books, 2009
- [7] Howard D. *Philosophy of Science*, 2004, 71(5): 669
- [8] Fedak W A, Prentis J J. *Am. J. Phys.*, 2009, 77: 128
- [9] Orwell G. *Nineteen Eighty-Four*. Secker & Warburg, 1949



高品质真空互联系统

安捷伦清洁真空及泄漏检测全套方案

- 超高真空离子泵
- 吸气剂复合型离子泵
- 钛升华复合型离子泵
- 多通道离子泵控制器
- 超高真空分子泵
- 无油静音前级泵
- 无油氮质谱检漏仪
- 真空阀门及管件
- 多种型号真空计
- 最高 12 通道真空计控制器



安捷伦科技（中国）有限公司真空事业部

800 820 6778（固定电话拨打）

400 820 6778（手机拨打）

下载样本或了解更多，请扫描上方二维码，
或登陆安捷伦官方网站：www.agilent.com
(点击“产品”选择“真空产品”)。