文章编号: 1004-4353(2014)01-0031-03

量子力学中能量算符的分析与讨论

赵培茈, 朱爱东*
(延边大学理学院 物理系, 吉林 延吉 133002)

摘要: 为了澄清量子力学中的哈密顿算符 $\hat{H}$ 和能量算符 $\hat{E}$ 的联系和区别,从 Schrödinger 方程出发,对哈密顿算符和能量算符进行了分析.通过分析两种算符在量子力学中的作用,明确了能量算符的意义.通过公式推导,说明了两种算符之间的联系.

关键词: 能量算符; 哈密顿量; 薛定谔方程
中图分类号: O413 **文献标识码:** A

Analysis and discussion about energy operators in quantum mechanics

ZHAO Peizi, ZHU Aidong*
(*Department of Physics*, *College of Science*, *Yanbian University*, *Yanji* 133002, *China*)

Abstract: In order to clarify the relationship and distinguish of the two kinds of energy operators in quantum mechanics, starting form the Schrodinger equation, by analyzing their function in quantum mechanics, the significance of the two kinds of energy operators, Hamilton and energy operator were demonstrated. Through simple derivation, the relation between the two operators were illustrated.

Key words: energy operator; Hamiltonian; Schrödinger equation

哈密顿算符 $\hat{H}$ 和能量算符 $\hat{E}(=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t})$ 是量子力学中的两个能量算符,其中哈密顿算符 $\hat{H}$ 在量子力学中扮演重要的角色.从具体物理系统的能量角度分析,哈密顿量直接关系到系统状态的确定与系统能量本征值的求解,因此人们倾向于将哈密顿算符 $\hat{H}$ 看作是量子力学中正统的能量算符[1].而对于能量算符 $\hat{E}$,量子力学教材中虽然不否认其是能量算符,但并未讨论其物理意义[2-3],尤其是在时能不确定性关系的物理意义问题上,$\hat{E}$ 是否为能量算符存在争议[4-6],文献[7-8]甚至认为其不是一个能量算符.对于能量算符 $\hat{E}$ 的这些争议,不仅给人们认识量子力学中的能量带来困惑,而且使其只能停留在数学定义上,无法得到运用[9-10].本文从 Schrödinger 方程出发,对这两种能量算符进行讨论,从量子力学的观点说明这两种算符的物理意义及其在量子力学中的地位和作用,从而加深对能量算符 $\hat{E}$ 的理解.

1 算符 $\hat{E}$ 和哈密顿量 $\hat{H}$ 物理意义的界定

Schrödinger 方程可写为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\varphi(r,t)=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V]\varphi(r,t), \tag{1}$$

收稿日期: 2013-09-24
* **通信作者:** 朱爱东(1968—),女,博士,教授,研究方向为量子信息与量子光学.

量子力学中的能量算符 $\hat{E}$ 为

$$\hat{E}=\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t},\tag{2}$$

而 Schrödinger 方程中的哈密顿算符 $\hat{H}$ 为

$$\hat{H}=[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V].\tag{3}$$

由(1)、(2) 和(3) 式可得到 Schrödinger 方程更普遍的形式：

$$\hat{E}\varphi(r,t)=\hat{H}\varphi(r,t),\tag{4}$$

其能量本征方程为

$$\hat{E}\varphi(r,t)=\hat{H}\varphi(r,t)=E\varphi(r,t).\tag{5}$$

由(4) 式可明显看出，Schrödinger 方程本质上就是能量算符方程的恒等式. 从(5) 式可以看出，能量算符 $\hat{E}$ 和哈密顿量 $\hat{H}$ 对应于相同的能量本征值. 从量子力学的角度来讲，它们对应于微观状态的同一可观测量 —— 能量. 既然能量算符 $\hat{E}$ 和哈密顿量 $\hat{H}$ 都对应于同一可观测量，那么其物理意义上没有本质的区别，它们都应是量子力学中的能量算符. 下面从两方面来分析它们的区别.

从算符本身的形式来看，能量算符 $\hat{E}$ 代表无限小时间平移的生成元，在微观过程中它是关于时间平移的量子化能量. 从守恒量与对称性的关系来讲，时间平移不变性对应于能量守恒；从力学量的测不准原理来讲，能量算符 $\hat{E}$ 与时间 t 存在测不准关系. 哈密顿量 $\hat{H}$ 则是通过物理系统内部相互作用的具体形式描写系统的总能量，针对不同的量子系统哈密顿量 $\hat{H}$ 的形式不同.

从量子力学中的算符化规则来看，在坐标表象中对于非定态问题所有的力学量需作变换：$r\rightarrow r$，$p\rightarrow-\mathrm{i}\hbar\nabla$，而哈密顿量 $\hat{H}$ 中组成能量的具体力学算符都符合这种变换，这样哈密顿量 $\hat{H}$ 就能在坐标表象中具体描写. 能量算符 $\hat{E}$ 对于任何系统都只有一种不变的形式，即(2) 式的形式，它不能表示成关于坐标的算符. 二者通过薛定谔方程联系起来，用于求解系统的时间演化规律. 但无论 $\hat{E}$ 和 $\hat{H}$ 形式如何，它们都对应于量子力学的同一可观测量 —— 能量，只是对波函数的作用结果不同而已，其物理本质是相同的，在这一点上它们没有任何区别.

2 算符 $\hat{E}$ 和哈密顿 $\hat{H}$ 的作用分析

下面从 Schrödinger 方程(4) 出发，讨论在定态和非定态的两种情况下，能量算符 $\hat{E}$ 和哈密顿量 $\hat{H}$ 的不同作用.

在非定态情况下，系统的哈密顿量 $\hat{H}$ 含时，此时能量取不确定的值. 将(5) 式写成：

$$\hat{H}\varphi(r,t)=E(r,t)\varphi(r,t),\tag{6}$$

$$\hat{E}\varphi(r,t)=E(r,t)\varphi(r,t).\tag{7}$$

求解方程(6) 可得能量本征值 $E(r,t)$，将 $E(r,t)$ 代入(7) 式并求解得

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\varphi(r,t)}{\partial t}=E(r,t)\varphi(r,t).$$

上式两端对时间积分得

$$\int_{t_0}^{t}\frac{1}{\varphi(r,\tau)}\frac{\partial\varphi(r,\tau)}{\partial\tau}\mathrm{d}\tau=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}E(r,\tau)\mathrm{d}\tau,$$

$$\int_{t_0}^{t}\frac{\partial\ln\varphi(r,\tau)}{\partial\tau}\mathrm{d}\tau=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}E(r,\tau)\mathrm{d}\tau,$$

$$\ln\varphi(r,\tau)\Big|_{t_0}^{t}=\ln\frac{\varphi(r,t)}{\varphi(r,t_0)}=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t}E(r,\tau)\mathrm{d}\tau,$$

$$\varphi(r,t)=\varphi(r,t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t}E(r,\tau)d\tau}. \tag{8}$$

可见在非定态下，通过哈密顿量 $\hat{H}$ 本征方程的求解，可以得到能量本征值. 由(8) 式可知，通过对能量算符 $\hat{E}$ 的本征方程的求解可以得到系统的状态.

在定态情况下，系统的哈密顿量 $\hat{H}$ 不显含时间，此时能量可取确定的值，波函数可以进行分离变量. 在(6) 式中设 $\varphi(r,t)=\varphi(r)f(t)$，于是(6) 式和(7) 式可进一步分别改写为定态 Schrödinger 方程：

$$\hat{H}\varphi(r)=E\varphi(r), \tag{9}$$

$$\hat{E}f(t)=Ef(t). \tag{10}$$

由(9) 式可以看出，定态 Schrödinger 方程其实就是不含时的哈密顿量 $\hat{H}$ 对应的能量本征方程. 对于不同的量子力学系统有不同的哈密顿量 $\hat{H}$，通过哈密顿量 $\hat{H}$ 的确定与定态 Schrödinger 方程的求解可以确定系统不含时部分的状态 $\varphi(r)$ 与能量本征值. 将(2) 式代入(10) 式后，积分可得到 $f(t)=f(t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}E(t-t_0)}$，这与(8) 式在定态下的结果是一致的.

对于(10) 式，在波函数未知的情况下，通过能量算符 $\hat{E}$ 的本征方程可以得到波函数含时部分的解 $f(t)$，即波函数随时间的演化规律. 这一点对于量子力学很有意义，因为量子力学中会有外界因素的变化使得波函数随时间的演化不再是一个均匀无衰减的项. 在波函数已知的情况下，通过求解能量算符 $\hat{E}$ 的本征方程可以求得哈密顿量 $\hat{H}$ 与能量算符 $\hat{E}$ 的共同本征值.

由(9) 式可求得 $\varphi(r)$ 和能量本征值 E，由(10) 式可求得 $f(t)$(在波函数已知的情况下也可求得能量本征值 E)，于是有：

$$E=\sum |C_n|^2 E_n, \tag{11}$$

$$\varphi(r,t)=\varphi(r)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \tag{12}$$

于是，系统的状态和性质可以通过求解哈密顿量 $\hat{H}$ 与能量算符 $\hat{E}$ 的本征方程得到解决. 另外，在定态下，由于能量具有确定值，(8) 式变成(12) 式(初始时刻 $t_0=0$). 由此可以看出，哈密顿量 $\hat{H}$ 与能量算符 $\hat{E}$ 是统一的.

3　结论

本文通过对能量算符 $\hat{E}$ 和哈密顿量 $\hat{H}$ 在物理意义上的分析，明确了其没有本质的区别，它们都是能量算符. 从作用来讲，能量算符 $\hat{E}$ 的本征方程在非定态的情况下，可求解系统的状态，在定态情况下可求解定态波函数含时的部分，并且在已知波函数的情况下可求解能量本征值；而哈密顿量 $\hat{H}$ 则可以通过具体的微观系统来确定，在定态情况下，系统不含时部分的态函数和能量本征值可通过求解定态 Schrödinger 方程来完成.

参考文献：

[1]　曾谨言. 量子力学教程[M]. 2 版. 北京：科学出版社，2008：15-22.
[2]　周世勋. 量子力学教程[M]. 2 版. 北京：高等教育出版社，1979：72-82.
[3]　褚圣麟. 原子物理学[M]. 北京：高等教育出版社，1979：82-89.
[4]　李春芳，王奇. 量子力学中的时间和能量算符[J]. 上海大学学报：自然科学版，1997(11)：278-280.
[5]　欧贤守. 关于时间-能量测不准关系[J]. 安庆师范学院学报，1992(1)：14-15.
[6]　郭贵春，赵丹. 论能量-时间不确定关系的解释语境[J]. 自然辩证法通讯，2007(2)：17-23.
[7]　李雅丽. 关于能量算符 $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ 的质疑[J]. 陕西广播电视大学学报，2000(2)：94-96.
[8]　何伯珩. $i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$ 是能量算符吗？[J]. 大学物理，1995(3)：28-29.
[9]　王智勇，熊彩东. 量子力学中的时间[J]. 物理学报，2007(6)：3070-3075.
[10]　吴新忠. 量子论的一种进化论解释[J]. 武钢职工大学学报，1999(4)：10-19.