1. 复习测量原理

对于算符Ω，在量子态$|\alpha\rangle$和$|\beta\rangle$之间的矩阵元$\langle\beta|\Omega|\alpha\rangle$有如下性质：

- $\langle\beta|\Omega|\alpha\rangle = \langle\beta|\cdot\Omega|\alpha\rangle = \langle\beta|\Omega\cdot|\alpha\rangle = (\Omega^\dagger|\beta\rangle)^\dagger\cdot|\alpha\rangle$
- 若Ω为厄米算符（即$\Omega^\dagger=\Omega$），则$\langle\beta|\Omega|\alpha\rangle = (\Omega|\beta\rangle)^\dagger\cdot|\alpha\rangle = \langle\beta|\Omega^\dagger\cdot|\alpha\rangle$。

测量原理指出，任意量子态$|\alpha\rangle$可以表示为一组正交归一基$|q_i\rangle$的线性组合，即$|\alpha\rangle=\sum_{i=1}^N c_i|q_i\rangle$，测量时得到本征值$q_i$的概率为$|c_i|^2$。

对于某个可观测量o，其期望值$\langle o\rangle = \langle\alpha|o|\alpha\rangle = \sum_{i,j}\langle\alpha|q_j\rangle\langle q_j|o|q_i\rangle\langle q_i|\alpha\rangle$，进一步化简为$\langle o\rangle = \sum_{i,j} c_j^* c_i q_i\langle q_j|q_i\rangle = \sum_i |c_i|^2 q_i$。

此外，在经典力学中，动力学变量$Q(p,q)$随时间的变化满足泊松括号$\{Q,H\}$:

$$\frac{dQ(p,q)}{dt} = \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{dq}{dt} + \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{dp}{dt} = \frac{\partial Q}{\partial q}\cdot\dot{q} + \frac{\partial Q}{\partial p}\cdot\dot{p} = \frac{\partial Q}{\partial q}\frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial Q}{\partial p}\frac{\partial H}{\partial q}$$

而在量子力学中，算符Ω随时间的变化为

$$\frac{d\Omega}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[\Omega,H] = \frac{1}{i\hbar}(\Omega H - H\Omega)$$

在海森堡绘景中，态矢不随时间变化（$\frac{d|\alpha\rangle}{dt}=0$）；在薛定谔绘景中，态矢随时间变化满足$\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t} = H|\beta\rangle$，虽然两者描述方式不同，但对于可观测量的期望值结果,可以证明是一致的。 下面证明不管是在海森堡绘景下，还是在薛定谔绘景下，上述算符的变化都可以用对易关系来描述。

2. 复习算符时间演化

- **海森堡绘景**：在量子力学里，海森堡绘景和薛定谔绘景通过时间演化算符$U(t)$相联系。设$|\psi_S(t)\rangle$是薛定谔绘景下的态矢，$|\psi_H\rangle$是海森堡绘景下的态矢，Ω_S是薛定谔绘景下的算符，$\Omega_H(t)$是海森堡绘景下的算符，则有：
  $|\psi_H\rangle = U^\dagger(t)|\psi_S(t)\rangle$，$\Omega_H(t) = U^\dagger(t)\Omega_S U(t)$
  其中时间演化算符$U(t)$满足薛定谔方程$i\hbar\frac{\partial U(t)}{\partial t} = HU(t)$，其共轭形式为$-i\hbar\frac{\partial U^\dagger(t)}{\partial t} = U^\dagger(t)H$（当然,$H$是厄米算符，即$H^\dagger=H$）。
- 算符的期望值随时间的变化为

$$\frac{d\langle Q\rangle}{dt} = \frac{d\langle\alpha|Q|\alpha\rangle}{dt} = \frac{d\langle\alpha|}{dt}Q|\alpha\rangle + \langle\alpha|\frac{dQ}{dt}|\alpha\rangle + \langle\alpha|Q\frac{d|\alpha\rangle}{dt}$$

利用海森堡绘景态矢量是固定的，不随时间变化，因此三项求导只剩下对算符的求导。我们把这里的算符从海森堡形式用时间演化算符展开成薛定谔绘景算符的形式。对$Q_H(t)=U^\dagger(t)Q_SU(t)$关于时间$t$求导，根据求导的乘积法则$\frac{d(ABC)}{dt}=\frac{dA}{dt}BC+A\frac{dB}{dt}C+AB\frac{dC}{dt}$，这里$A=U^\dagger(t)$，$B=Q_S$（$Q_S$不显含时间，即$\frac{dQ_S}{dt}=0$），$C=U(t)$，可得：

$$\frac{dQ_H(t)}{dt}=\frac{\partial U^\dagger(t)}{\partial t}Q_SU(t)+U^\dagger(t)\frac{\partial Q_S}{\partial t}U(t)+U^\dagger(t)Q_S\frac{\partial U(t)}{\partial t}$$

由于薛定谔算符是不含时间的，因此$\frac{\partial Q_S}{\partial t}=0$，则：

$$\frac{dQ_H(t)}{dt}=\frac{\partial U^\dagger(t)}{\partial t}Q_SU(t)+U^\dagger(t)Q_S\frac{\partial U(t)}{\partial t}$$

将$i\hbar\frac{\partial U(t)}{\partial t}=HU(t)$和$-i\hbar\frac{\partial U^\dagger(t)}{\partial t}=U^\dagger(t)H$代入上式：

$$\begin{aligned}\frac{dQ_H(t)}{dt}&=\frac{-1}{i\hbar}U^\dagger(t)HQ_SU(t)+\frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t)Q_SHU(t)\\&=\frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t)(Q_SH-HQ_S)U(t)\\&=\frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t)Q_SHU(t)-U^\dagger(t)HQ_SU(t)\\&=\frac{1}{i\hbar}U^\dagger(t)Q_SU(t)U^\dagger(t)HU(t)-U^\dagger(t)HU(t)U^\dagger(t)Q_SU(t)\\&=\frac{1}{i\hbar}Q_HH-HQ_H\end{aligned}$$

这里倒数第二行用到了插入单位算符$I=U^\dagger U$。最后一行用到将薛定谔算符换成海森堡算符，并且注意时间演化算符显然与哈密顿算符H对易，因此$U^\dagger(t)HU(t)=H$,于是，下面代回去算符期望值公式，得到:

$$\frac{d\langle\alpha\rangle}{dt}=\frac{1}{i\hbar}\langle\alpha|[Q,H]|\alpha\rangle$$

这里再次强调定义，其中$Q^{(H)}=U^\dagger Q^{(S)}U$为海森堡绘景下的算符（$U$是时间演化算符，满足$|\alpha,t\rangle=U|\alpha,0\rangle$且$U^\dagger U=1$）

- 这个式子刚好就是第一节测量理论里，理论力学泊松括号修改为对易关系的形式；这某种意义上说明了理论力学到量子力学，似乎存在着哈密顿量对应哈密顿算符、泊松括号对应算符对易关系的联系。

- **薛定谔绘景**：态矢随时间变化,而算符不随时间显式变化,事实上这个应该是入门时最先学的绘景,显然对时间的求导现在剩下两项

$$\frac{d\langle Q\rangle_S}{dt}=\frac{d\langle\alpha|}{dt}Q|\alpha\rangle+\langle\alpha|Q\frac{d|\alpha\rangle}{dt}$$

考虑最原始的薛定谔方程，其形式用右矢和左矢量表示为

$$H|\alpha\rangle=i\hbar\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t}\qquad\langle\alpha|H^\dagger=-i\hbar\frac{\partial\langle\alpha|}{\partial t}$$

其中哈密顿算符H由于一般我们认为是能量的本征算符，当然是厄密的，故

$$H|\alpha\rangle=i\hbar\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t}\qquad\langle\alpha|H=-i\hbar\frac{\partial\langle\alpha|}{\partial t}$$

由于态矢量一般我们认为是一个随时间演化的函数，它的演化只与时间t这一个变量有关，因此偏导和求导dt没有区别,于是上面我直接把左右矢代回去，可以得到

$$\begin{aligned}\frac{d\langle Q\rangle_S}{dt}&=\frac{-1}{i\hbar}\langle\alpha|HQ|\alpha\rangle+\frac{1}{i\hbar}\langle\alpha|QH|\alpha\rangle\\&=\frac{1}{i\hbar}\langle\alpha|(QH-HQ)|\alpha\rangle\\&=\frac{1}{i\hbar}\langle\alpha|[Q,H]|\alpha\rangle\end{aligned}$$

3. 复习不同表象

离散谱H表象下

设$|\alpha\rangle=\sum_j c_j|a_j\rangle$，则$\langle a_i|\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t}=\langle a_i|H|\alpha\rangle$中， 将$|\alpha\rangle$展开，对时间求导链式法则，利用基矢量不随时间变化的性质，系数关系得到

$$i\hbar\cdot\dot{c}_i=\sum_j H_{ij}c_j$$

或者张量的形式

$$i\hbar\dot{c}^i=\sum_j H^i_jc^j$$

连续谱r表象下

$|\alpha\rangle=\int dr|r\rangle\langle r|\alpha\rangle=\int dra(r)|r\rangle$。需要注意的是，不要漏了右矢$|r\rangle$和积分变量$dr$. 显然对于连续谱的位置r有正交关系$\langle r'|r''\rangle=\delta(x'-x'')$。下面我们考虑

$$i\hbar\frac{\partial|\alpha\rangle}{\partial t}=H|\alpha\rangle$$
$$i\hbar\int dr\frac{\partial a(r)|r\rangle}{\partial t}=H\int dra(r)|r\rangle$$

第一行第二行是左右两侧都用连续表象展开的结果，下面我们进一步考虑第二行等式右侧的表述，将哈密顿换个地方，之后插入单位算符:

$$H\int dra(r)|r\rangle=\int drH|r\rangle a(r)=\iint drdr'|r'\rangle\langle r'|H|r\rangle a(r)$$

于是往回代入，得到：

$$i\hbar\int dr\frac{\partial a(r)|r\rangle}{\partial t}=\iint drdr'|r'\rangle\langle r'|H|r\rangle a(r)$$

式子右边是r'上的分量，我们希望式子左边也是这样的分量，于是插入单位算符$I=\int dr'|r'\rangle\langle' r|$(当然这一步本质上其实就是取投影)，利用正交性结果为：

$$i\hbar\int dr'\frac{\partial a(r')}{\partial t}|r'\rangle=\iint drdr'|r'\rangle\langle r'|H|r\rangle a(r)$$

那么两边关于r'的分量现在是一样的，现在提取出分量来，不需要取dr'积分了，得到系数关系为:

$$i\hbar\frac{\partial a(r')}{\partial t}=\int dr\langle r'|H(x,p)|r\rangle a(r)=\hat{H}a(r)$$

这里将哈密顿算符H的函数变量显示写了出来，其与正则坐标和动量有关；随后我们可以定义对于坐标表象的哈密顿算符

$$\hat{H}=\langle r'|H(x,p)|r\rangle$$

于是仿照之前离散表象的系数演化公式，即张量求和约定的形式，本质上这里就会变成一个积分号

$$i\hbar\dot{a}(r') = \int dr\hat{H}a(r)$$

这里的分量$a(r)$，也称为坐标表象波函数，而哈密顿量正是我们之前在初等量子力学一开始学过的哈密顿算符，在坐标表象下有:

$$\hat{H} = \langle r'|H(x,p)|r\rangle = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2 + V(r)\right]\delta(r'-r)$$

读者如果无法认可这里突然出现的狄拉克函数，或者说认为我们之前根本没有推导过动量和坐标算符的具体形式(尽管初等量子力学里直接给出了)，这里不可以这么写，那么这种想法是对的。这个问题我们将在下一节讨论，或者读者可以参考喀兴林老师的《高等量子力学》的第一二章。

把狄拉克函数积分掉，最终的方程为:

$$i\hbar\frac{\partial a(r')}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{r'}^2 + V(r')\right)a(r')$$

这就是坐标波函数含时薛定谔方程。下面我们开始补充证明为什么算符$\hat{p}$以及$\hat{x}$会出现狄拉克函数以及为什么有偏导产生。