量子力学の基礎
北野正雄 (京都大学大学院工学研究科)
kitano@kuee.kyoto-u.ac.jp　2007 年 10 月 16 日
この内容は京都大学工学部電気電子工学科における授業「電気電子工学のための量子論」の補助的資料として準備されたものです．個人使用以外の目的で利用される場合には著者の許諾を得てください．

第 6 章
時間発展

量子系の時間発展は時刻でパラメータづけられたユニタリ変換で表される．また時間発展を微分方程式の形で表すと, 時間発展演算子の微分としてハミルトニアンが得られる．また, 時間発展のルールとしてシュレディンガー方程式が得られる．

6.1 時間発展演算子

6.1.1 対角的な場合

量子系は基本的に振動子の集まりである*1)．適当な基底で展開すると, 状態の時間変化は

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i \xi_i(t)|e_i\rangle = \sum_i \xi_i(0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_i t}|e_i\rangle \tag{6.1}$$

のように表すことができる．つまり, 各モード i がそれぞれの角周波数 ω_i で単振動しているのである．これをさらに,

$$|\psi(t)\rangle = \sum_i |e_i\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_i t}\langle e_i|\psi(0)\rangle = \hat{U}_0(t)|\psi(0)\rangle \tag{6.2}$$

と変形する．$\xi_i(0) = \langle e_i|\psi(0)\rangle$ を用いた．ここで,

*1)　これは非常に重要な事実である．「世の中すべて振動」ということである．しかも量子論ではエネルギーも質量も振動に対応している．

$$\hat{U}_0(t) = \sum_i |e_i\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_i t}\langle e_i| \tag{6.3}$$

は, $|\psi(0)\rangle$ と $|\psi(t)\rangle$ を結びつける演算子である.

$$\begin{aligned}\hat{U}_0^\dagger(t)\hat{U}_0(t) &= \sum_i |e_i\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_i t}\langle e_i| \sum_j |e_j\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_j t}\langle e_j| \\ &= \sum_i \sum_j |e_i\rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_i t}\delta_{ij}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_j t}\langle e_j| = \sum_i |e_i\rangle\langle e_i| = \hat{1}\end{aligned} \tag{6.4}$$

が成り立っている. すなわち, $\hat{U}_0(t)$ はユニタリである. 時間発展において内積が保存されることが分かる: $\langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(0)|\psi(0)\rangle$. また,

$$\hat{U}_0(t) = \exp(-\mathrm{i}\hat{\Omega}_0 t), \quad \hat{\Omega}_0 = \sum_i |e_i\rangle\omega_i\langle e_i| \tag{6.5}$$

と表すこともできる. ここで, 時間に依存しない演算子 $\hat{\Omega}_0$ はエルミート (実対角行列) であることに注意する. さらに,

$$\hat{U}_0(t_1 + t_2) = \hat{U}_0(t_1)\hat{U}_0(t_2) \tag{6.6}$$

が成り立つ. 実際,

$$\begin{aligned}\hat{U}_0(t_1 + t_2) &= \sum_i |e_i\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_i(t_1+t_2)}\langle e_i| \\ &= \sum_i \sum_j |e_i\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_i t_1}\langle e_i|e_j\rangle \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_i t_2}\langle e_j| \\ &= \hat{U}_0(t_1)\hat{U}_0(t_2)\end{aligned} \tag{6.7}$$

のように変形できる. また,

$$\hat{U}_0(-t) = [\hat{U}_0(t)]^{-1}, \quad \hat{U}_0(0) = \hat{1} \tag{6.8}$$

も成り立つ.

$\hat{U}_0(t)$ の時間微分は

$$\frac{\hat{U}_0(t+\Delta t) - \hat{U}_0(t)}{\Delta t} = \frac{\hat{U}_0(\Delta t) - \hat{1}}{\Delta t}\hat{U}_0(t) \to -\mathrm{i}\hat{\Omega}_0\hat{U}_0(t) \quad (|\Delta t| \to 0) \tag{6.9}$$

なので, $\hat{U}_0(t)$ は (演算子に対する) 微分方程式

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}_0(t) = \hat{\Omega}_0\hat{U}_0(t), \quad \hat{U}_0(0) = \hat{1} \tag{6.10}$$

を満たす.

$$\hat{U}_0(\Delta t) \sim \hat{1} - \mathrm{i}\hat{\Omega}_0\Delta t \quad (|\Delta t| \to 0) \tag{6.11}$$

を用いた[*2].

ケット $|\psi(t)\rangle$ に対する微分方程式は

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}_0(t)|\psi(0)\rangle = \hat{\Omega}_0\hat{U}_0(t)|\psi(0)\rangle = \hat{\Omega}_0|\psi(t)\rangle, \tag{6.12}$$

となる. 同様に, ブラ $\langle\psi(t)| = (|\psi(t)\rangle)^\dagger$ に対する微分方程式は

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi(t)| = -\langle\psi(t)|\hat{\Omega}_0, \tag{6.13}$$

となる.

エルミート演算子 $\hat{\Omega}_0$ は各状態 i の振動数 ω_i を与えているが, 量子力学の基本要請から, $\hbar\omega_i$ はその状態のエネルギー E_i に等しいはずである. したがって,

$$\hat{H}_0 = \hbar\hat{\Omega}_0 = \sum_i |e_i\rangle E_i \langle e_i| \tag{6.14}$$

は, エネルギーに対応する演算子になっている. これを, 状態の運動方程式 (6.12) に代入すると,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}_0|\psi(t)\rangle \tag{6.15}$$

となる. これがシュレディンガー方程式である.

6.1.2 一般の場合

これまでは, $\hat{U}_0(t)$ や $\hat{\Omega}_0$ が対角的である基底を仮定したが, その制約をはずしても, 上記の性質のほとんどは成り立つ.

ほとんど, 繰り返しになるが, 一般の場合を見ておこう. まず (対角的であるとは限らない) ハミルトニアン $\hat{H}$ が与えられる. これは対応する古典系がある場合には, エネルギーを演算子として書き直したものになる. ハミルトニアンはエルミートである. 系の運動方程式は,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{6.16}$$

である. これを解くと,

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)|\psi(0)\rangle, \quad \hat{U}(t) = \exp\frac{\hat{H}t}{i\hbar} \tag{6.17}$$

となる. $\hat{U}(t)$ は時間発展演算子とよばれ, ユニタリである. 時間発展演算子を計算しておけば, 任意の初期状態 $|\psi(0)\rangle$ に対する運動を知ることができる.

時間発展演算子は微分方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}(t) = \hat{H}\hat{U}(t), \quad \hat{U}(0) = \hat{1} \tag{6.18}$$

を満たし, つぎのような性質を持つ;

*2) 厳密には $||\hat{\Omega}_0\Delta t|| \ll 1$.

$$\hat{U}(t_1+t_2)=\hat{U}(t_1)\hat{U}(t_2),$$
$$\hat{U}(0)=\hat{1},\quad \hat{U}(-t)=(\hat{U}(t))^{-1}=\hat{U}^\dagger(t). \tag{6.19}$$

後ろ 2 つの式は, 最初の関係から, 導くことができる.

6.2 演算子の時間発展 — Heisenberg 描像

状態 $|\psi\rangle$ と演算子 $\hat{A}$ できまるスカラー量

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi=\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle \tag{6.20}$$

を, $\hat{A}$ の $|\psi\rangle$ に対する期待値, あるいは平均値とよぶ. (理由については第 7 章でのべる.)

問題 6.1 すべての $|\psi\rangle\in\mathcal{H}$ について, $\langle\psi|\hat{A}_1|\psi\rangle=\langle\psi|\hat{A}_2|\psi\rangle$ が成り立てば, $\hat{A}_1=\hat{A}_2$ であること示せ.

ヒルベルト空間の状態ケットがすべて,

$$|\psi(t)\rangle=\hat{U}(t)|\psi(0)\rangle \tag{6.21}$$

に従って時間変化しているとする. 一方, $\hat{A}$ を時間を陽に含まない演算子であるとする. $\hat{A}$ の期待値は状態の時間変化を通して, 時間変化する. その時間変化は

$$\begin{aligned}\langle\hat{A}\rangle_\psi(t)&=\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle=\langle\psi(0)|\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)|\psi(0)\rangle\\&=\langle\psi(0)|\hat{A}(t)|\psi(0)\rangle\end{aligned} \tag{6.22}$$

である. ただし,

$$\hat{A}(t):=\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t). \tag{6.23}$$

$\hat{A}$ の期待値を計算する際に, このように, 状態は変化せず $|\psi(0)\rangle$ のままで, 演算子の方が $\hat{A}(t)$ のように変化すると考えることもできる. このような見方をハイゼンベルク描像 (Heisenberg picture) という. それに対して, 従来の見方, すなわち式 (6.16) に相当するものを, シュレディンガー描像 (Schrödinger picture) という.

ハミルトニアンを対角化する基底での $\hat{A}(t)$ の行列表現を求めると,

$$\hat{A}(t)=\left(\sum_i|e_i\rangle\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_i t}\langle e_i|\right)\hat{A}\left(\sum_j|e_j\rangle\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_j t}\langle e_j|\right) \tag{6.24}$$
$$=\sum_i\sum_j|e_i\rangle A_{ij}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_i-\omega_j)t}\langle e_j| \tag{6.25}$$

となる. $(\hat{A}(t))_{ij}$ は状態 i と状態 j の周波数の差 $\omega_i - \omega_j = (E_i - E_j)/\hbar$ で振動していることが分かる. 一般の基底に対しては, 行列要素はこれらの振動の重ね合わせで表すことができる.

$\hat{A}(t)$ の満たす運動方程式は,

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t) &= \mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\hat{U}^\dagger(t)\hat{A}\hat{U}(t)\right) \\
&= \left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U^\dagger\right)\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{A}\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U\right) \\
&= -\hat{U}^\dagger\hat{H}\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{H}\hat{U} \\
&= -\hat{H}\hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U} + \hat{U}^\dagger\hat{A}\hat{U}\hat{H}, \qquad (6.26)
\end{aligned}$$

つまり,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{A}(t) = [\hat{A}(t), \hat{H}] \qquad (6.27)$$

である. $\hat{U}(t)$, $\hat{H}$ が交換することなどを用いた.

$[\hat{A}, \hat{H}] = 0$ のとき, $\hat{A}(t) = \hat{A}$ (一定) は方程式 (6.27) の解である. すなわち, ハミルトニアンと可換な演算子は時間的に変化しないことが分かる.

問題 6.2 $\hat{H}$ の期待値の時間変化を調べよ.

6.3 中間表示

ハミルトニアンが (必ずしも可換でない)2 つの項からなる場合を考える.

$$\hat{H} = \hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)} \qquad (6.28)$$

シュレディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(0)\rangle \qquad (6.29)$$

の解 $|\psi(t)\rangle$ と, $\hat{H}^{(0)}$ に対応する時間発展演算子 $\hat{U}^{(0)}(t) = \exp(-\mathrm{i}\hat{H}^{(0)}t/\hbar)$ から

$$|\psi^{(1)}(t)\rangle = \hat{U}^{(0)\dagger}(t)|\psi(t)\rangle \quad (= \hat{U}^{(0)\dagger}(t)\hat{U}(t)|\psi(0)\rangle\ ) \qquad (6.30)$$

を定義する. すると,

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi^{(1)}(t)\rangle &= -\hat{U}^{(0)\dagger}\hat{H}^{(0)}|\psi(t)\rangle + \hat{U}^{(0)\dagger}(\hat{H}^{(0)} + \hat{H}^{(1)})|\psi(t)\rangle \\
&= \hat{U}^{(0)\dagger}\hat{H}^{(1)}|\psi(t)\rangle = \hat{U}^{(0)\dagger}\hat{H}^{(1)}\hat{U}^{(0)}|\psi^{(1)}(t)\rangle \qquad (6.31)
\end{aligned}$$

となる. 演算子も,

$$\hat{A}'(t) = \hat{U}^{(0)\dagger}(t)\hat{A}\hat{U}^{(0)}(t) \tag{6.32}$$

のように, $\hat{H}^{(0)}$ に従って変化する. 結局,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi^{(1)}(t)\rangle = \hat{H}^{(1)'}(t)|\psi^{(1)}(t)\rangle, \quad \hat{H}^{(1)'}(t) = \hat{U}^{(0)\dagger}(t)\hat{H}^{(1)}\hat{U}^{(0)}(t) \tag{6.33}$$

とくに, $\hat{H}^{(0)}$ と $\hat{H}^{(1)}$ が可換の場合には, $\hat{H}^{(1)'} = \hat{H}^{(1)}$ であり, $\hat{U}(t) = \hat{U}^{(0)}(t)\hat{U}^{(1)}(t)$ のように簡単になる.

このように, 状態も演算子も変化させるものを中間表示 (interaction picture) という.

6.4 Baker-Campbell-Hausdorff の定理

$\hat{A}$, $\hat{B}$ が可換の場合には, $\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}$, $\mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{\hat{A}}$ のように, 通常の指数関数の公式が使えるが, 一般の演算子に対してはこのような変形は許されない. もう少し一般に近い場合の公式として以下のようなものがある. Baker-Campbell-Hausdorff の定理と呼ばれるものである. 演算子が交換できないことのむずかしさを見るために証明の例を見ておこう.

演算子 $\hat{A}$, $\hat{B}$ が $[\hat{A},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$, $[\hat{B},[\hat{A},\hat{B}]] = 0$ を満たすとき,

$$\mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{\hat{A}} = \mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{[\hat{B},\hat{A}]} \tag{6.34}$$

および,

$$\mathrm{e}^{\hat{A}+\hat{B}} = \mathrm{e}^{\hat{A}}\mathrm{e}^{\hat{B}}\mathrm{e}^{[\hat{B},\hat{A}]/2} \tag{6.35}$$

が成り立つ.

証明

前者は後者が成り立てば, 自動的に成り立つ. 後者を証明するために, まず

$$\hat{B}(\tau) = \mathrm{e}^{-\hat{A}\tau}\hat{B}\mathrm{e}^{\hat{A}\tau} \tag{6.36}$$

を定義する. すると,

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\hat{B}(\tau) = [\hat{B}(\tau),\hat{A}] = \hat{\mathcal{A}}(\hat{B}) \tag{6.37}$$

が成り立つ. この演算子 $\hat{B}$ に関する微分方程式を初期値 $\hat{B}(0) = \hat{B}$ の下で解いてみる. ただし,

$$\hat{\mathcal{A}}(\sqcup) = [\sqcup,\hat{A}] \tag{6.38}$$

は超演算子あるいはリウビル演算子と呼ばれるもので, 演算子から演算子を線形的に対応させる作用である. 超演算子の和や積, スカラー倍は自然に定義で

きる．

超演算子の指数関数は,

$$\exp \hat{\mathcal{A}}\tau = \hat{\mathcal{I}} + \tau\hat{\mathcal{A}} + (\tau^2/2!)\hat{\mathcal{A}}^2 + \cdots \tag{6.39}$$

あるいは,

$$(\exp \mathcal{A}\tau)(\sqcup) = \sqcup + \tau[\sqcup, \hat{A}] + (\tau^2/2!)[[\sqcup, \hat{A}], \hat{A}] + \cdots \tag{6.40}$$

と定義できる．$\mathcal{I}$ は恒等超演算子である．これを用いて, 微分方程式 (6.37) の解は

$$\hat{B}(\tau) = (\exp \hat{\mathcal{A}}\tau)(\hat{B}) = \hat{B} + \tau[\hat{B}, \hat{A}] + (\tau^2/2)[[\hat{B}, \hat{A}], \hat{A}] + \cdots \tag{6.41}$$

これを (6.36) と比較し, さらに $[\hat{A}, \hat{B}]$ が $\hat{A}$, $\hat{B}$ とそれぞれ交換することを利用すると,

$$\mathrm{e}^{-\hat{A}\tau}\hat{B}\mathrm{e}^{\hat{A}\tau} = \hat{B} + [\hat{B}, \hat{A}]\tau \tag{6.42}$$

すなわち,

$$\hat{B}\mathrm{e}^{\hat{A}\tau} = \mathrm{e}^{\hat{A}\tau}(\hat{B} + [\hat{B}, \hat{A}]\tau) \tag{6.43}$$

が得られる．これを利用して, 式 (6.35) の右辺に τ を含めたものを微分すると,

$$\begin{aligned}
&\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\left(\mathrm{e}^{\hat{A}\tau}\mathrm{e}^{[\hat{B},\hat{A}]\tau^2/2}\mathrm{e}^{\hat{B}\tau}\right) = \mathrm{e}^{\hat{A}\tau}(\hat{A} + \hat{B} + [\hat{B}, \hat{A}]\tau)\mathrm{e}^{[\hat{B},\hat{A}]\tau^2/2}\mathrm{e}^{\hat{B}\tau} \\
&= (\hat{B} + [\hat{A}, \hat{B}]\tau + \hat{A} + [\hat{B}, \hat{A}]\tau)\mathrm{e}^{\hat{A}\tau}\mathrm{e}^{[\hat{B},\hat{A}]\tau^2/2}\mathrm{e}^{\hat{B}\tau} \\
&= (\hat{A} + \hat{B})\mathrm{e}^{\hat{A}\tau}\mathrm{e}^{[\hat{B},\hat{A}]\tau^2/2}\mathrm{e}^{\hat{B}\tau}
\end{aligned} \tag{6.44}$$

が得られる．つまり, 微分方程式 $(\mathrm{d}/\mathrm{d}\tau)\hat{C} = (\hat{A} + \hat{B})\hat{C}$ を満たしているということである．初期条件 $\hat{C}(0) = \hat{1}$ を考慮すると,

$$\mathrm{e}^{(\hat{A}+\hat{B})\tau} = \mathrm{e}^{\hat{A}\tau}\mathrm{e}^{[\hat{B},\hat{A}]\tau^2/2}\mathrm{e}^{\hat{B}\tau} \tag{6.45}$$

が成り立っているといえる．$\tau = 1$ とすると結果が得られる．

6.5 時間に依存するハミルトニアン

ハミルトニアンが時刻に陽に依存する場合を考える．これは系が古典的な外場を通して制御されている場合などに相当する．逆に外部と切り離された系のハミルトニアンは時間に依存しない．運動方程式は

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle \tag{6.46}$$

である．$\hat{H}(t)$ は時間に依存するエルミート演算子である．エルミート性から,

内積の保存

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\phi|\psi\rangle = \langle\phi|\hat{H}(t)|\psi\rangle - \langle\phi|\hat{H}^\dagger(t)|\psi\rangle = 0 \tag{6.47}$$

は成り立っている.

時刻 $t = t_1$ に正規直交基底 $\{|e_i(t_1)\rangle\}$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$ を選び, 各基底ベクトルを $t = t_2$ まで時間発展させたもの $\{|e_i(t_2)\rangle\}$ は, やはり正規直交基底をなす. したがって,

$$\hat{U}(t_2, t_2) = \sum_{i=1}^{n} |e_i(t_2)\rangle\langle e_i(t_1)| \tag{6.48}$$

はユニタリ演算子である. ハミルトニアンが時間に依存する場合, 時間発展演算子は開始時刻 t_1, 終了時刻 t_2 の両方に依存するものになる. 明らかに,

$$\hat{U}(t_3, t_1) = \hat{U}(t_3, t_2)\hat{U}(t_2, t_1), \quad \hat{U}(t_1, t_2) = \hat{U}^\dagger(t_2, t_1) \tag{6.49}$$

が成り立つ.

ハミルトニアンが時間に依存しない場合, 任意の T について

$$\hat{U}(t_2, t_1) = \hat{U}(t_2 + T, t_1 + T) \tag{6.50}$$

が成り立つので,

$$\hat{U}(t_2, t_1) = \hat{U}(t_2 - t_1, t_1 - t_1) = \hat{U}(t_2 - t_1, 0) =: \hat{U}(t_2 - t_1) \tag{6.51}$$

のように, 時間発展演算子は時間差のみに依存して, 実質的に 1 変数の関数になる.

$\hat{U}(t_2.t_1)$ と $\hat{H}(t)$ の関係を具体的に見るために, まず, 時間が区間 $I_k = [t_k, t_{k+1})$ $(k = \ldots, -1, 0, 1, \ldots)$ に分割されており,

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_k \quad (t \in I_k) \tag{6.52}$$

であるとする. $t_1 \in I_i$, $t_2 \in I_j$ $(t_1 < t_2,\ i < j)$ である場合,

$$\begin{aligned}\hat{U}(t_2, t_1) = \exp\frac{(t_2 - t_j)\hat{H}_j}{\mathrm{i}\hbar}\exp\frac{(t_j - t_{j-1})\hat{H}_{j-1}}{\mathrm{i}\hbar}\cdots \\ \exp\frac{(t_{i+2} - t_{i+1})\hat{H}_{i+1}}{\mathrm{i}\hbar}\exp\frac{(t_{i+1} - t_1)\hat{H}_i}{\mathrm{i}\hbar}\end{aligned} \tag{6.53}$$

となる.

すべてのハミルトニアンが互いに可換の場合, すなわち, $[\hat{H}_k, \hat{H}_l] = 0$ $(i \le k, l \le j)$ が成り立つ場合には,

$$\begin{aligned}\hat{U}(t_2, t_1) = \exp\frac{\hbar}{\mathrm{i}}[(t_2 - t_j)\hat{H}_j + (t_j - t_{j-1})\hat{H}_{j-1} + \cdots \\ + (t_{i+2} - t_{i+1})\hat{H}_{i+1} + (t_{i+1} - t_1)\hat{H}_i]\end{aligned} \tag{6.54}$$

のように簡単化することができる.

ここで, 区間を細かく分割することで, $\hat{H}(t)$ が連続的に変化する場合の式

$$\hat{U}(t_2,t_1) = \exp\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_1}^{t_2}\hat{H}(t)\mathrm{d}t \tag{6.55}$$

が得られる. ただし, $[\hat{H}(t),\hat{H}(t')]=0$ $(t_1 \le t, t' \le t_2)$ が成り立つことが必要である.

可換でない場合には, 単純に

$$\hat{U}(t_2,t_1) = \lim_{N\to\infty}\prod_{k=0}^{N-1}\left(\hat{1}+\frac{\hat{H}(k\Delta t)\Delta t}{\mathrm{i}\hbar}\right) \tag{6.56}$$

を計算するのが直接的である. ただし, $\Delta t = (t_2-t_1)/N$ である. また, 積の順序 $\prod_{k=1}^{n}\hat{a}_k = \hat{a}_n\cdots\hat{a}_1$ にも注意を払う必要がある.

やや, 別の表現を求めておこう. 簡単のために, 時間の原点を t_1 にとって $(t\to t-t_1)$, $\hat{U}(t)=\hat{U}(t,0)$ とおく.

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}(t) = \epsilon\hat{H}(t)\hat{U}(t) \tag{6.57}$$

ここに,

$$\hat{U}(t) = \hat{U}^{(0)}(t)+\epsilon\hat{U}^{(1)}(t)+\epsilon^2\hat{U}^{(2)}(t)+\cdots \tag{6.58}$$

を代入して, ϵ (後に 1 とおく) の次数で整理すると,

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{U}^{(n)}(t) = \hat{H}(t)\hat{U}^{(n-1)}(t) \tag{6.59}$$

が得られる. $\hat{U}^{(0)}(t)=\hat{1}$ から始めて, 積分によって各項を逐次求めることができる.

$$\begin{aligned}
\hat{U}^{(1)}(t) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{d}\tau_1\hat{H}(\tau_1),\\
\hat{U}^{(2)}(t) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \mathrm{d}\tau_2\hat{H}(\tau_2)\hat{U}^{(1)}(\tau_2) = \frac{1}{(\mathrm{i}\hbar)^2}\int_0^t \mathrm{d}\tau_2\hat{H}(\tau_2)\int_0^{\tau_2}\mathrm{d}\tau_1\hat{H}(\tau_1),\\
&\cdots\\
\hat{U}^{(n)}(t) &= \frac{1}{(\mathrm{i}\hbar)^n}\int_0^t \mathrm{d}\tau_n\hat{H}(\tau_n)\cdots\int_0^{\tau_3}\mathrm{d}\tau_2\hat{H}(\tau_2)\int_0^{\tau_2}\mathrm{d}\tau_1\hat{H}(\tau_1).
\end{aligned} \tag{6.60}$$

ここで, ハミルトニアンの引数の時刻の順序 $t\ge\tau_n\ge\cdots\ge\tau_2\ge\tau_1$ に注意する. この和はダイソン級数とよばれ

$$\hat{U}(t) = \mathrm{T}\exp\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t\hat{H}(\tau)\mathrm{d}\tau \tag{6.61}$$

と表される. T は時間順序 (time-ordered) 積と呼ばれ, 時間順序を保っている項のみを残す指令である. たとえば, 2 つの積に対して,

$$\mathrm{T}\hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) = \begin{cases} \hat{H}(t_1)\hat{H}(t_2) & (t_1 \geq t_2) \\ \hat{H}(t_2)\hat{H}(t_1) & (t_1 \leq t_2) \end{cases}. \tag{6.62}$$

のように.

問題 6.3 任意の時刻のハミルトニアンが交換する場合に, 式 (6.55) に帰着することを示せ. $n!$ に注意せよ.

問題 6.4 式 (6.56) が式 (6.61) になることを示せ.

問題 6.5 ハミルトニアンが時間依存の場合の, エネルギー固有状態の振舞や存在について考察せよ.

問題 6.6 $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t_1}\hat{U}(t_2, t_1)$, $\mathrm{i}\hbar\dfrac{\partial}{\partial t_2}\hat{U}(t_2, t_1)$ をそれぞれ求めよ.

ev.tex,v, v. 1.6 (2007/10/16) ©2007, Masao Kitano