シュレディンガー表現のハミルトニアンについて

ブラケット記法を用いたときのハミルトニアン $\hat{H}$ とシュレディンガー表現のハミルトニアン $H(\{\hat{p}_i, \hat{q}_i\})$ との相互の関係について，ちょっと気になったので書いてみます.

よくある間違い

ここではありがちなミスと思われるものを一つ紹介しよう．いま，ブラケット記法でシュレディンガー方程式を表すと,

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{1}$$

と表せるので，この両辺に左側から $\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|$ を作用させると，まず左辺は,

$$\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|\Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t, q_1, q_2, \cdots, q_n) \tag{2}$$

となる．一方右辺は,

$$\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|\hat{H}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|\Psi(t)\rangle = \hat{H}\Psi(t, q_1, q_2, \cdots, q_n) \tag{3}$$

なので (!?)，両辺を結んで,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t, q_1, q_2, \cdots, q_n) = \hat{H}\Psi(t, q_1, q_2, \cdots, q_n) \tag{4}$$

である．こうしてシュレディンガー表現のシュレディンガー方程式が得られた (!?)

分かっている人にとってはこれはくだらないミスなのだろうが，当然この論理は成り立たない．何故なら，よく見ると右辺の式変形の中でハミルトニアン $\hat{H}$ とブラベクトル $\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|$ を交換しているが，左辺の時間微分の交換とは異なりこの交換は成り立たないからである.

0.1.1　正しい議論

それではどうすれば正しい議論ができるのであろうか?　それには次のようにすればよい.

まずシュレディンガー表現のシュレディンガー方程式

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{5}$$

の両辺に左側からブラベクトル $\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|$ を作用させるのは一緒である．このとき左辺については，時間についての微分と座標成分のみ含むブラベクトル $\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|$ が交換するから,

$$\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|\Psi(t)\rangle = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(t, q_1, q_2, \cdots, q_n) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\{t, q_i\}) \tag{6}$$

といった具合に「間違った議論」のときと同じ流れが成り立つ.

一方の右辺は,

$$\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|\hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{7}$$

となるが，ハミルトニアン $\hat{H}$ とブラベクトル $\langle q_1, q_2, \cdots, q_n|$ は交換しないのでこのままでは式変形を続行することができない.

そこで，ハミルトニアン $\hat{H}$ とシュレディンガー表現でのハミルトニアン $H(\{\hat{p}_i,\, \hat{q}_i\})$ との関係式,

$$\hat{H}|\Psi(t)\rangle = \int dq_1 \int dq_2 \cdots \int dq_n H(\{\hat{p}_i,\, q_i\})\Psi(\{t\, q_i\})|q_1,\, q_2,\, \cdots,\, q_n\rangle \tag{8}$$

の両辺に $\langle q_1,\, q_2,\, \cdots,\, q_n|$ を左側から作用させると,

$$\begin{aligned}
\langle q_1,\, q_2,\, \cdots,\, q_n|\hat{H}|\Psi(t)\rangle &= \langle q_1,\, q_2,\, \cdots,\, q_n| \int dq'_1 \int dq'_2 \cdots \int dq'_n H(\{\hat{p}_i,\, q'_i\})\Psi(\{t,\, q'_i\})|q'_1,\, q'_2,\, \cdots,\, q'_n\rangle && (9)\\
&= \int dq'_1 \int dq'_2 \cdots \int dq'_n H(\{\hat{p}_i,\, q'_i\})\Psi(\{t,\, q'_i\})\langle q_1,\, q_2,\, \cdots,\, q_n|q'_1,\, q'_2,\, \cdots,\, q'_n\rangle && (10)\\
&= \int dq'_1 \int dq'_2 \cdots \int dq'_n H(\{\hat{p}_i,\, q'_i\})\Psi(\{t,\, q'_i\})\delta(q_1 - q'_1)\delta(q_2 - q'_2)\cdots\delta(q_n - q'_n) && (11)\\
&= H(\{\hat{p}_i,\, q_i\})\Psi(\{t,\, q_i\}) && (12)
\end{aligned}$$

が成り立つので，両辺を結んで,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\{t,\, q_i\}) = H(\{\hat{p}_i,\, q_i\})\Psi(\{t,\, q_i\}) \tag{13}$$

が成り立つことが示せた．これは正しい式変形である.