## -1.2　状態の時間発展からシュレディンガー方程式を導く

時刻 $t_0$ の量子系の状態ケットを $|\Psi(t_0)\rangle$ としよう．状態の時間発展を考えると時間 $t$ 後の状態ケットは，$|\Psi(t_0+t)\rangle$ となる．ここで微小時間 $\Delta t$ 後の状態の時間発展は，$\Delta t$ に依存する演算子 $\hat{U}(\Delta t)$ によって

$$|\Psi(t'+\Delta t)\rangle = \hat{U}(\Delta t)|\Psi(t')\rangle \tag{1}$$

と表せるはずである．いま，$|\Psi(t'+2\Delta t)\rangle$ 後の状態は，$|\Psi(t')\rangle$ の $2\Delta t$ 後の時間とも $|\Psi(t'+\Delta t)\rangle$ の $\Delta t$ 後の状態とも表せるから，

$$\hat{U}(2\Delta t)|\Psi(t') = |\Psi(t'+2\Delta t)\rangle = \hat{U}(\Delta t)|\Psi(t'+\Delta t)\rangle = \hat{U}(\Delta t)\hat{U}(\Delta t)|\Psi(t')\rangle \tag{2}$$

と表せるので，

$$U(2\Delta t) = \hat{U}(\Delta t)\hat{U}(\Delta t) \tag{3}$$

が成り立つ．したがって時間 $t = n\Delta t$ 後の $|\Psi(t')$ の状態は，$\hat{U}(\Delta t)$ を積み重ねて

$$|\Psi(t'+t)\rangle = \overbrace{\hat{U}(\Delta t)\cdots\hat{U}(\Delta t)}^{n\text{ 個}}|\Psi(t')\rangle = \hat{U}(n\Delta t)|\Psi(t')\rangle = \hat{U}(t)|\Psi(t')\rangle \tag{4}$$

と表すことができる．ここで，状態ケットはどの時点でも規格化されるべきだから，

$$1 = \langle\Psi(t')|\Psi(t')\rangle = \langle\Psi(t'+t)|\Psi(t'+t)\rangle = \langle\Psi(t')|\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)|\Psi(t')\rangle \tag{5}$$

より，

$$\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t) = \hat{1} \tag{6}$$

が成り立つことになる．従って，状態ベクトルの時間発展はユニタリ演算子 $\hat{U}(t)$ によって行われることが分かる．ここで，

$$\hat{U}(0)|\Psi(t')\rangle = |\Psi(t'+0)\rangle = |\Psi(t')\rangle = \hat{1}|\Psi(t')\rangle \tag{7}$$

より，任意の状態ケットに対してこれが成り立つためには，

$$\hat{U}(0) = \hat{1} \tag{8}$$

でなければないことも分かる．ここで時間の起点は

$$\hat{U}(t)|\Psi(t_0)\rangle = \hat{U}(t)\hat{U}(t_0)|\Psi(0)\rangle = \hat{U}(t_0+t)|\Psi(0)\rangle \tag{9}$$

より，どこにとってもよいから，簡単に $t_0 = 0$ としよう．このとき，

$$|\Psi(t+\Delta t)\rangle = \hat{U}(\Delta t)|\Psi(t)\rangle \tag{10}$$

また，

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{1}|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(0)|\Psi(t)\rangle \tag{11}$$

だから両者を引いて $\Delta t$ で割ってやると，

$$\frac{|\Psi(t+\Delta t)\rangle - |\Psi(t)\rangle}{\Delta t} = \frac{\hat{U}(\Delta t) - \hat{U}(0)}{\Delta t}|\Psi(t)\rangle \tag{12}$$

が得られるので，この両辺の極限をとると，

$$\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \frac{d}{dt}\hat{U}(t)\bigg|_{t=0}|\Psi(t)\rangle \tag{13}$$

が得られる．ここで $\displaystyle\frac{d}{dt}\hat{U}(t)\bigg|_{t=0}$ は時間に依存しない演算子であるので

$$\frac{d}{dt}\hat{U}(t)\bigg|_{t=0} = \frac{1}{i\hbar}\hat{H} \tag{14}$$

と置くことができる．なお，右辺の係数が $i\hbar$ の逆数に選んだのは最終的に得られる式をエネルギーの次元にするためであって，そうでなければ勿論自由に選べる．すると

$$\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \frac{1}{i\hbar}\hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{15}$$

より，

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\Psi(t)\rangle = \hat{H}|\Psi(t)\rangle \tag{16}$$

が得られる．これが量子系の時間発展を表すシュレディンガー方程式のブラケット記法版である．