経路積分と量子力学

Ⅰ.ハイゼンベルグ表示とシュレディンガー表示

時刻 t のある粒子（量子）の位置を q とする。ハイゼンベルグ表示の時、

- 対応する位置演算子は**時間に依存する**ので、$\hat{q}(t)$ で表わす。
- 時刻 t の位置 q に対応する固有ベクトル：$|q(t)\rangle$ で表わす。
- 位置演算子 $\hat{q}(t)$ は固有値として位置 q を与え

$$\hat{q}(t)|q(t)\rangle = q|q(t)\rangle \tag{9.1}$$

を満たす。

- 時刻 t のある粒子の状態は、**時間に依存しない**ので、$|\psi\rangle$ で表わす。
- 観測値は、平均値として

$$q_{\text{観測}}(t) = \langle\psi|\hat{q}(t)|\psi\rangle \tag{9.2}$$

で計算される。ここに、$\langle\psi| = (|\psi\rangle)^{\dagger}\left(= (|\psi\rangle)^{*T}\right)$ である。

シュレディンガー表示の時、

- 対応する位置演算子は**時間に依存しない**ので、$\hat{q}\left(=\hat{q}(0)\right)$ で表わす。
- 時刻 t の位置 q に対応する固有ベクトル：$|q\rangle\left(=|q(0)\rangle\right)$ で表わす。
- 位置演算子 $\hat{q}$ は固有値として位置 q を与え

$$\hat{q}|q\rangle = q|q\rangle \Leftarrow \begin{cases} \hat{q} = \hat{q}(0) \\ |q\rangle = |q(0)\rangle \end{cases} \tag{9.3}$$

を満たす。

- 時刻 t のある粒子の状態は、**時間に依存する**ので、$|\psi(t)\rangle$ で表わす。
- 観測値は、平均値として

$$q_{\text{観測}}(t) = \langle\psi(t)|\hat{q}|\psi(t)\rangle \tag{9.4}$$

で計算される。

観測値は同じなので、

$$q_{\text{観測}}(t) = \overbrace{\langle\psi(t)|\hat{q}(0)|\psi(t)\rangle}^{\langle\psi(t)|\hat{q}|\psi(t)\rangle} = \overbrace{\langle\psi(0)|\hat{q}(t)|\psi(0)\rangle}^{\langle\psi|\hat{q}(t)|\psi\rangle} \tag{9.5}$$

が成立する。ここに、

$$\begin{cases} \text{シュレディンガー表示の}\hat{q}=\hat{q}(0) \\ \text{ハイゼンベルグ表示の}|\psi\rangle=|\psi(0)\rangle \end{cases} \tag{9.6}$$

である。

ハイゼンベルグ表示の演算子 $\hat{q}(t)$ とシュレディンガー表示の演算子 $\hat{q}(=\hat{q}(0))$ は、(9.5)を満たす必要がある。$|\psi(t)\rangle$ がシュレディンガー方程式を満たすことより、簡単な関係式を導くことができる。ハミルトニアンを $\hat{H}$ とすれば、$|\psi(t)\rangle$ は、シュレディンガー方程式：

$$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle \tag{9.7}$$

に従う。ハミルトニアンを $\hat{H}$ は、エネルギーに対応する物理量なので、

$$\hat{H}^{\dagger}=\hat{H} \tag{9.8}$$

を満たす（**【問題１】** $\hat{H}^{\dagger}=\hat{H}$ が成り立つことを証明せよ。）。$\hat{H}$ は、

- 位置演算子：$\hat{q}$ と表している
- 運動量演算子：$\hat{p}$ と表す
  - 運動量演算子の固有値 p ： $\hat{p}|p\rangle=p|p\rangle$ (9.9)
- 時間：t と表している

の関数：$\hat{H}(\hat{q},\hat{p},t)$ であるが、特に、$\hat{H}$ が陽に時間に依存しない場合には、$\hat{H}(\hat{q},\hat{p})$ と表せるので

$$\frac{\partial\hat{H}}{\partial t}=0 \tag{9.10}$$

が成立する。この場合、初期時間を t_0 とすると

$$\begin{cases} |\psi(t)\rangle=\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|\psi(t_0)\rangle \\ \langle\psi(t)|=\langle\psi(t_0)|\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right) \end{cases} \quad (t>t_0) \tag{9.11}$$

が解になる（**【問題２】**(9.11)が(9.7)：$i\hbar\frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle=\hat{H}|\psi(t)\rangle$ の解である事を示せ。）。[1]　これを用いると、(9.5)より右辺は

[1] $\hat{H}$ が陽に時間に依存する場合は、$|\psi(t')\rangle=\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'}\hat{H}(q,p,t'')dt''\right)|\psi(t)\rangle$ である。

$$q_{観測}(t)=\langle\psi(t)|\hat{q}(0)|\psi(t)\rangle=\langle\psi(0)|\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)\hat{q}(0)\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)|\psi(0)\rangle \tag{9.12}$$

であり、左辺 $q_{観測}(t)=\langle\psi(0)|\hat{q}(t)|\psi(0)\rangle$ に等しいので

$$\boxed{\overbrace{\hat{q}(t)}^{\text{ハイゼンベルグ表示}}=\overbrace{\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)\hat{q}(0)\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)}^{\text{シュレディンガー表示}}} \tag{9.13}$$

がわかる。

また、位置の固有ベクトル $|q(t)\rangle$ は、

- 直交性：$\langle q'(t)|q(t)\rangle=\delta(q'-q)$ 或は $\langle q'|q\rangle=\delta(q'-q)$ (9.14)
  - $|q\rangle=|q(0)\rangle,|q'\rangle=|q'(0)\rangle$ (9.15)
  - $\delta(q'-q)=\frac{1}{2\pi}\int\exp(i(q'-q)k)dk\left(=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\exp(i(q'-q)k)dk\right)$ (9.16)
  - 積分範囲が表示されていなくても、$-\infty\to\infty$ の定積分 $\int_{-\infty}^{\infty}$ である。以降、同様。
- 完全性：$\int|q(t)\rangle dq\langle q(t)|=I$ 或は $\int|q\rangle dq\langle q|=I$ $\left(|q\rangle=|q(0)\rangle,|q'\rangle=|q'(0)\rangle\right)$ (9.17)
  - 直交性と完全性の両立：(9.15)の $\langle q'(t)|q(t)\rangle$ に完全性を用い、再度、直交性を用いて、計算すると(9.15)が再現される：

$$\langle q'(t)|q(t)\rangle=\langle q'(t)|I|q(t)\rangle=\langle q'(t)|\left(\int|q''(t)\rangle dq''\langle q''(t)|\right)|q(t)\rangle$$

$$=\int\delta(q'-q'')\delta(q''-q)dq''=\delta(q'-q)$$

を満たす。同様に、運動量の固有ベクトル $|p(t)\rangle$ も

- 直交性：$\langle p'(t)|p(t)\rangle=\delta(p'-p)=\frac{1}{2\pi}\int\exp(i(p'-p)k)dk$ (9.18)
- 完全性：$\int|p(t)\rangle dp\langle p(t)|=I$ 或は $\int|p\rangle dp\langle p|=I$ $\left(|p\rangle=|p(0)\rangle\right)$ (9.19)

を満たす。更に、

$$[\hat{q},\hat{p}]=i\hbar \tag{9.20}$$

の関係がある。特に、完全性(9.17)を(9.5)に用いると、

$$\overbrace{\langle\psi(t)|\hat{q}(0)|\psi(t)\rangle}^{\langle\psi(t)|\hat{q}|\psi(t)\rangle}=\langle\psi(t)|\hat{q}I|\psi(t)\rangle=\langle\psi(t)|\hat{q}\int|q\rangle dq\langle q|\psi(t)\rangle=\langle\psi(t)|\int q|q\rangle dq\langle q|\psi(t)\rangle$$

$$=\int q\overbrace{\langle\psi(t)|q\rangle}^{\psi^*(q,t)}dq\overbrace{\langle q|\psi(t)\rangle}^{\psi(q,t)} \tag{9.21}$$

$$q_{観測}(t)=\overbrace{\langle\psi(0)|\hat{q}(t)|\psi(0)\rangle}^{\langle\psi|\hat{q}(t)|\psi\rangle}$$

より、数学の関数の表記：シュレディンガーの波動関数$\psi(q,t)$

$$\begin{cases}\psi(q,t)=\langle q|\psi(t)\rangle\\ \psi^*(q,t)=\langle\psi(t)|q\rangle\end{cases} \tag{9.22}$$

に移れば、

$$\overbrace{\langle\psi(t)|\hat{q}|\psi(t)\rangle}^{\langle\psi(t)|\hat{q}(0)|\psi(t)\rangle}=\int q\psi^*(q,t)\psi(q,t)dq \tag{9.23}$$

と表わせる。位置をxで表わし馴染みの結果：

$$\overbrace{\langle\psi(t)|\hat{x}|\psi(t)\rangle}^{\langle\psi(t)|\hat{q}(0)|\psi(t)\rangle}=\int x|\psi(x,t)|^2dx \tag{9.24}$$

を得る。

Ⅱ.シュレディンガーの遷移確率振幅

シュレディンガーの波動関数$\psi(q,t)=\langle q|\psi(t)\rangle$に、(9.17)を考慮して

$$\langle q|\psi(t)\rangle=\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|\psi(t_0)\rangle=\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)\overbrace{\left(\int|q'\rangle dq'\langle q'|\right)}^{I}|\psi(t_0)\rangle$$

$$=\int\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle dq'\langle q'|\psi(t_0)\rangle\ (t>t_0) \tag{9.25}$$

を得る。つまり

$$\psi(q,t)=\int dq'\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle\psi(q',t_0) \tag{9.26}$$

である。こに現れる

- $\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle\ (t>t_0)$を**シュレディンガーの遷移確率振幅**

と呼ぶ。この振幅が、$\langle q(t)|q'(t_0)\rangle\ (t>t_0)$に等しいことを導く。その結果、**シュレディンガー**

の遷移確率振幅とは、

- 時刻 t の位置 q に存在した粒子が時刻 t' に位置 q' に見出す確率振幅
  - $F(q't';qt)$ と表すことにする

である。従って、$F(q't';qt)$ は、量子力学からの定義により $|q(t)\rangle$ を用いて

$$F(q't';qt)=\langle q'(t')|q(t)\rangle \quad (t'>t) \tag{9.27}$$

と表せる。

シュレディンガーの遷移確率振幅

まず、$\langle q'|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t'-t)\right)|q\rangle$ を $|q(t)\rangle$ で表わすために、$|q(t)\rangle$ と $|q\rangle(=|q(0)\rangle)$ の関係を導く。

(9.13)の $q(t)=\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)\hat{q}(0)\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)$ を $\hat{q}|q\rangle=q|q\rangle$（或は、$\hat{q}(0)|q(0)\rangle=q|q(0)\rangle$）に用いる。$\hat{q}(0)|q(0)\rangle=q(0)|q(0)\rangle$ の左側から $\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)$ を両辺に掛け

$$\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)\hat{q}(0)\overbrace{\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)}^{=I}|q(0)\rangle=\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)q(0)|q(0)\rangle \tag{9.28}$$

を得る。左辺を $q(t)=\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)\hat{q}(0)\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)$ に置き換えて

$$q(t)\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)|q(0)\rangle=\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)q|q(0)\rangle \tag{9.29}$$

であるので、(9.1)を用いて

$$\begin{cases}|q(t)\rangle=\exp\left(i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)\overbrace{|q\rangle}^{|q(0)\rangle}\\ \langle q(t)|=\overbrace{\langle q|}^{\langle q(0)|}\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)\end{cases} \tag{9.30}$$

- $|\psi(t)\rangle=\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}t\right)|\psi(0)\rangle$ とは、exp( )内の符号の違いに注意。

を得る（**【問題３】**(9.30)を導け。）。従って、(9.30)より、簡単に

$$\langle q'|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t'-t)\right)|q\rangle = \langle q'(t')|q(t)\rangle \tag{9.31}$$

が導かれる（**【問題４】**(9.31)を導け。）。以上から、$F(q't';qt)$ の定義式：(9.27)は、

$$\boxed{F(q't';qt) = \overbrace{\langle q'(t')|q(t)\rangle}^{\text{ハイゼンベルグ表示}} = \overbrace{\langle q'|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t'-t)\right)|q\rangle}^{\text{シュレディンガー表示}} \quad (t'>t)} \tag{9.32}$$

- $\langle q'(t')|$、$|q(t)\rangle$：ハイゼンベルグ表示
- $\langle q'|$、$|q\rangle$：シュレディンガー表示

と計算される。その結果、(9.26)の波動関数は

$$\boxed{\psi(q,t) = \int dq' \overbrace{\langle q(t)|q'(t_0)\rangle}^{\text{ハイゼンベルグ表示}} \psi(q',t_0)} \tag{9.33}$$

で表わせる。

グリーン関数

シュレディンガーの遷移確率振幅は、数学では、

- $\langle q(t)|q'(t_0)\rangle = \langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle \quad (t>t_0)$ を**グリーン関数** (9.34)

という関数に対応する。$\langle q(t)|q'(t_0)\rangle$ が満たす方程式がグリーン関数の満たす方程式：

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}H\right)\langle q(t)|q'(t_0)\rangle = \delta(t-t_0)\delta(q-q') \tag{9.35}$$

- シュレディンガー方程式、$\left(\frac{\partial}{\partial t}+\frac{i}{\hbar}H\right)|\psi(t)\rangle = 0$ に対応する。

に従うことを示す。まず、$\langle q(t)|q'(t_0)\rangle = \langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle \quad (t>t_0)$ に付いている条件：$t>t_0$ が自動的に満たされるようにする。つまり、

- **因果律**の仮定

である。この仮定は、階段関数（step function）

$$\theta(t) = \begin{cases} 1\cdots t>0 \\ 0\cdots t<0 \end{cases} \tag{9.36}$$

により取り込むことができ、$t>t_0$ 条件が外れた

$$\boxed{\langle q(t)|q'(t_0)\rangle = \theta(t-t_0)\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle} \tag{9.37}$$

に修正される。

グリーン関数の満たす方程式：(9.35)を示すために、$\frac{\partial}{\partial t}\langle q(t)|q'(t_0)\rangle$ を計算すればよい。つまり、

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle q(t)|q'(t_0)\rangle = \langle q|\frac{d}{dt}\left[\theta(t-t_0)\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)\right]|q'\rangle \tag{9.38}$$

より（**【問題５】**偏微分 $\frac{\partial}{\partial t}$ が $\frac{d}{dt}$ に変えられるのは何故か？）、

$$\langle q|\hat{H}|q'\rangle f(q') = \langle q|\hat{H}(\hat{p},\hat{q})|q'\rangle f(q') = \delta(q-q')H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'},q'\right)f(q') \tag{9.39}$$

の関係式を用いて

$$\langle q|\hat{H}\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle = H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q},q\right)\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle \tag{9.40}$$

を得る。従って、(9.38)の右辺：

$$\begin{aligned}\langle q|\frac{d}{dt}\left[\theta(t-t_0)\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)\right]|q'\rangle &= \frac{d\theta(t-t_0)}{dt}\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle \\ &\quad -\frac{i}{\hbar}H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q},q\right)\theta(t-t_0)\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle\end{aligned} \tag{9.41}$$

である（**【問題６】**(9.41)を導け。）。故に、

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle q(t)|q'(t_0)\rangle = \frac{d\theta(t-t_0)}{dt}\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle - \frac{i}{\hbar}H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q},q\right)\langle q(t)|q'(t_0)\rangle \tag{9.42}$$

を得る。ここで、

$$\frac{d}{dt}\theta(t-t_0) = \delta(t-t_0) \tag{9.43}$$

なので（**【問題７】** δ 関数の条件の一つ：$\int_{-\infty}^{\infty}\delta(t)dt = 1$ を $\delta(t) = \frac{d\theta(t)}{dt}$ の時に導け。）

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle q(t)|q'(t_0)\rangle = \delta(t-t_0)\langle q|q'\rangle - \frac{i}{\hbar}H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q},q\right)\langle q(t)|q'(t_0)\rangle \tag{9.44}$$

を得る。また、(9.15)の直交性より、最終的に

$$\boxed{\left(\frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}H\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q},q\right)\right)\langle q(t)|q'(t_0)\rangle = \delta(t-t_0)\delta(q-q')} \tag{9.45}$$

の結果を得る（**【問題８】**(9.45)を導け。）。この方程式は、(9.35)と同じなので

- $\langle q(t)|q'(t_0)\rangle = \theta(t-t_0)\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t-t_0)\right)|q'\rangle$ が**グリーン関数**である

事を示している。

Ⅲ.経路積分

シュレディンガーの波動関数の時間発展は、(9.33)の $\psi(q,t)=\int dq'\langle q(t)|q'(t_0)\rangle\psi(q',t_0)$ で与えられるので、$\langle q(t)|q'(t_0)\rangle$ が計算できれば良い。この節では、

- 時間変数を、t,t_0 から t',t に変更
- 位置情報を、$q\leftrightarrow q'$ の入れ替え
  - $\langle q(t)|q'(t_0)\rangle \to \langle q'(t')|q(t)\rangle$

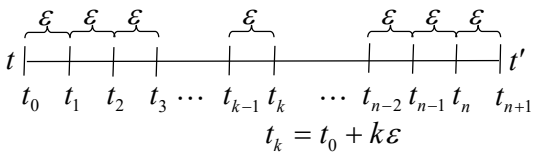
を施し、

$$F(q't';qt)=\overbrace{\langle q'(t')|q(t)\rangle}^{\text{ハイゼンベルグ表示}} \tag{9.46}$$

を計算する。そのために、$t-t'\approx 0$ の場合を考えることにより $\langle q'(t')|q(t)\rangle$ が計算できる様な工夫をする。つまり、

$$t-t'\approx 0 \text{ の時の近似：} \exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t'-t)\right)=I-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t'-t)+\overbrace{(t'-t)^2 \text{ 以上の次数の項}}^{\text{無視できるくらい小さい}(t'-t)^2\text{の値}} \tag{9.47}$$

を用いる。実際は、$t-t'\approx 0$ ではないので、$t-t'$ を細かく区切ってこの近似が使える区間を作る。つまり、時間経過：$t\to t'$ に伴って



のように、$n+1$ 個の微小な時間間隔 ε を持つ区間に分割する。その時、

$$\begin{cases} t=t_0 \\ t'=t_{n+1}=t+(n+1)\varepsilon \end{cases} \tag{9.48}$$

である。時間の順序は、$t'>t_n>t_{n-1}>\cdots>t_2>t_1>t$ に決めているので、この順序を指定することで、

- **因果律を暗黙に要請**

している。ここで、この時間間隔にそれぞれ、(9.17)の完全性を当てがって、

$$F(q't';qt)=\langle q'(t')|q(t)\rangle=\langle q'(t')|\overbrace{\left(\int|q_n(t_n)\rangle dq_n\langle q_n(t_n)|\right)}^{I}\overbrace{\left(\int|q_{n-1}(t_{n-1})\rangle dq_{n-1}\langle q_{n-1}(t_{n-1})|\right)}^{I}$$
$$\cdots\overbrace{\left(\int|q_2(t_2)\rangle dq_2\langle q_2(t_2)|\right)}^{I}\overbrace{\left(\int|q_1(t_1)\rangle dq_1\langle q_1(t_1)|\right)}^{I}|q(t)\rangle \tag{9.49}$$

とする。積分記号を整理して

$$\langle q'(t')|q(t)\rangle=\int dq_1dq_2\cdots dq_{n-1}dq_n\langle q'(t')|q_n(t_n)\rangle\langle q_n(t_n)|q_{n-1}(t_{n-1})\rangle\cdots\langle q_2(t_2)|q_1(t_1)\rangle\langle q_1(t_1)|q(t)\rangle$$

- $\int dq_1dq_2\cdots dq_{n-1}dq_n=\int dq_1\int dq_2\cdots\int dq_{n-1}\int dq_n$ の略記 (9.50)

である。これを、

$$\prod_{i=1}^{n}dq_i=dq_1dq_2\cdots dq_{n-1}dq_n$$
$$\prod_{k=1}^{n+1}\langle q_k(t_k)|q_{k-1}(t_{k-1})\rangle=\langle q'(t')|q_n(t_n)\rangle\langle q_n(t_n)|q_{n-1}(t_{n-1})\rangle\cdots\langle q_2(t_2)|q_1(t_1)\rangle\langle q_1(t_1)|q(t)\rangle \tag{9.51}$$
$$\Leftarrow\begin{cases}q_0(t_0)=q(t)\\ q_{n+1}(t_{n+1})=q'(t')\end{cases}$$

で表記すると

$$\boxed{\langle q'(t')|q(t)\rangle=\int\prod_{i=1}^{n}dq_i\prod_{k=1}^{n+1}\langle q_k(t_k)|q_{k-1}(t_{k-1})\rangle} \tag{9.52}$$

と簡潔になる。微小時間間隔の遷移確率振幅は、(9.32)により

$$\overbrace{\langle q_k(t_k)|q_{k-1}(t_{k-1})\rangle}^{\text{ハイゼンベルグ表示}}=\overbrace{\langle q_k|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}(t_k-t_{k-1})\right)|q_{k-1}\rangle}^{\text{シュレディンガー表示}}\ (t_k>t_{k-1}\text{は既に仮定されている}) \tag{9.53}$$

であるが、微小時間間隔 ε の設定より、(9.47)を用いて

$$\langle q_k(t_k)|q_{k-1}(t_{k-1})\rangle=\langle q_k(t_{k-1}+\varepsilon)|q_{k-1}(t_{k-1})\rangle=\delta(q_k-q_{k-1})-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\langle q_k|\hat{H}|q_{k-1}\rangle+\mathcal{O}(\varepsilon^2) \tag{9.54}$$

- $\mathcal{O}(\varepsilon^2)$[オーダー ε^2 と読む]は、「無視できるくらい小さい ε^2 の項」を表わす

を得る（**【問題９】**(9.54)を導け。）。$\langle q_k|\hat{H}|q_{k-1}\rangle$ の計算では、$\hat{H}$ は p,q の関数である。特に、ニュートン力学に対応する $\hat{H}$ は、全エネルギーに対応するので、

$$\boxed{\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+U(\hat{q})} \tag{9.55}$$

と与えられる（**【問題１０】** $E=\frac{p^2}{2m}+U(x)$ のとき、$F\left(=m\frac{d^2x}{dt^2}\right)=-\frac{dU}{dx}$ を用いて、$\frac{dE}{dt}=0$ を

導け。)。従って、

$$\langle q_k|\hat{H}|q_{k-1}\rangle = \frac{1}{2m}\langle q_k|\hat{p}^2|q_{k-1}\rangle + \langle q_k|U(\hat{q})|q_{k-1}\rangle \tag{9.56}$$

である。

まず、$\langle q_k|U(\hat{q})|q_{k-1}\rangle$ を計算すると

$$\langle q_k|U(\hat{q})|q_{k-1}\rangle = \begin{cases} \delta(q_k - q_{k-1})U(q_{k-1}) \\ \delta(q_k - q_{k-1})U(q_k) \end{cases} \tag{9.57}$$

の 2 通りの結果（**【問題１１】**(9.57)を導け。）を得るが、どちらも、$\delta(q_k - q_{k-1})$ より、$q_k = q_{k-1}$ なので同じ答えになる。この様な場合、通常 $U(q_k)$ を「対称化」して[2]

$$\boxed{\langle q_k|U(\hat{q})|q_{k-1}\rangle = \delta(q_k - q_{k-1})U\left(\frac{q_k + q_{k-1}}{2}\right)} \tag{9.58}$$

と表わす。残りの $\langle q_k|\hat{p}^2|q_{k-1}\rangle$ を計算するため、(9.19)の完全性を（シュレディンガー表示：$t=0$ & $|p\rangle = |p(0)\rangle$）用いて,

$$\langle q_k|\hat{p}^2|q_{k-1}\rangle = \int dp'dp\langle q_k|p'\rangle\langle p'|\hat{p}^2|p\rangle\langle p|q_{k-1}\rangle \tag{9.59}$$

である。$\langle p'|\hat{p}^2|p\rangle$ は、(9.9)より計算できるので、$\langle q_k|p'\rangle$（と $\langle p|q_{k-1}\rangle$）が分かれば良い。そこで、$\langle q_k|p'\rangle$ を求めるために、$\langle q|p\rangle$ $(q = q_k, p = p')$ が満たすべき関係式として、(9.20)より得られる

$$\langle q|[\hat{q},\hat{p}]|p\rangle = i\hbar\langle q|p\rangle \tag{9.60}$$

を用いる。そのために、$\langle q|\hat{p}\hat{q}|p\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\langle q|\hat{q}|p\rangle$ の関係式を用いる。これは

$$\langle q|[\hat{q},\hat{p}]|\psi(t)\rangle = i\hbar\langle q|\psi(t)\rangle \tag{9.61}$$

より、

$$\boxed{\langle q|\hat{p}|\psi(t)\rangle = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\langle q|\psi(t)\rangle} \tag{9.62}$$

---

[2] 演算子では、$\hat{p}\hat{q}$ と $\hat{q}\hat{p}$ は違う。どのような順序にするかを決める必要があるが、経路積分で使われる順序をワイル順序 (Weyl ordering) と呼ぶ。座標が二つの点の平均値となる中点処方 (midpoint prescription) は、演算子のワイル順序にあたる。

と表わせば、(9.61)が成立する事より分かる（**【問題１２】**(9.62)が(9.61)を満たす事を導け）。

つまり、(9.62)に於て$\left|\psi(t)\right\rangle=\hat{q}\left|p\right\rangle$にすれば、

$$\boxed{\left\langle q\middle|\hat{p}\hat{q}\middle|p\right\rangle=\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\left\langle q\middle|\hat{q}\middle|p\right\rangle} \tag{9.63}$$

を得る。(9.63)を(9.60)に適用して、$\left\langle q\middle|p\right\rangle$の微分方程式を解けば

$$\begin{cases}\left\langle q\middle|p\right\rangle=N\exp\left(i\dfrac{p}{\hbar}q\right)\\ \left\langle p\middle|q\right\rangle=\left(\left\langle q\middle|p\right\rangle\right)^{\dagger}=N^{*}\exp\left(-i\dfrac{p}{\hbar}q\right)\end{cases}\quad\left(N:\text{複素数の比例係数}\right) \tag{9.64}$$

を得る（**【問題１３】**(9.64)を導け。又、$\left\langle p\middle|q\right\rangle=\left(\left\langle q\middle|p\right\rangle\right)^{\dagger}$を示せ）。比例係数$N$を求めるために、

- $\left|q\right\rangle$の直交性
- $\left|p\right\rangle$の完全性

を用いる。つまり、

$$\begin{cases}\left\langle q'\middle|q\right\rangle=\delta(q'-q)=\dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int\exp\left(i(q'-q)k\right)dk\\ \left\langle q'\middle|q\right\rangle=\left\langle q'\middle|\overbrace{\displaystyle\int\left|p\right\rangle dp\left\langle p\right|}^{1}\middle|q\right\rangle\end{cases} \tag{9.65}$$

である。従って、

$$\left\langle q'\middle|q\right\rangle=\left|N\right|^{2}\hbar\int\exp\left(i(q'-q)k\right)dk \tag{9.66}$$

と計算できる（**【問題１４】**(9.66)を導け）。つまり、

$$\left|N\right|^{2}\hbar=\frac{1}{2\pi} \tag{9.67}$$

を得る。以上から、

$$\boxed{\left\langle q\middle|p\right\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\exp\left(i\frac{p}{\hbar}q\right)\ \left(N\text{を実数に取った}\right)} \tag{9.68}$$

と求められる。(9.59)は

$$\boxed{\left\langle q_k\middle|\hat{p}^{2}\middle|q_{k-1}\right\rangle=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\,p^{2}\exp\left(i\frac{p\left(q_k-q_{k-1}\right)}{\hbar}\right)} \tag{9.69}$$

となる（**【問題１５】**(9.69)を導け）。ここでも、(9.57)の様に、(9.59)にも$\left\langle p'\middle|\hat{p}^{2}\middle|p\right\rangle=\begin{cases}p^{2}\delta(p'-p)\\ p'^{2}\delta(p'-p)\end{cases}$

が現れるが、どちらも同じ結果になる。一般的に、

$$\boxed{\langle q_k | f(\hat{p},\hat{q}) | q_{k-1}\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp f\left(p,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\exp\left(i\frac{p(q_k-q_{k-1})}{\hbar}\right)} \tag{9.70}$$

が成立する（**【問題１６】** $f(\hat{p},\hat{q})=U(\hat{q})$ の時、(9.58)を導け）。

以上をまとめると、

$$\delta(q_k-q_{k-1}) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \exp\left(i\frac{p(q_k-q_{k-1})}{\hbar}\right) \tag{9.71}$$

を、$\langle q_k | U(\hat{q}) | q_{k-1}\rangle = \delta(q_k-q_{k-1})U\left(\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)$ に適用して、最終的に、(9.56)は、

$$\langle q_k | \hat{H} | q_{k-1}\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \exp\left(i\frac{p(q_k-q_{k-1})}{\hbar}\right)\left(\frac{p^2}{2m}+U\left(\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right) \tag{9.72}$$

と計算できる（**【問題１７】**(9.72)を導け）。ここで、

$$H\left(p,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right) = \frac{p^2}{2m}+U\left(\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right) \tag{9.73}$$

と表わして

$$\boxed{\langle q_k | \hat{H} | q_{k-1}\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \exp\left(i\frac{p(q_k-q_{k-1})}{\hbar}\right)H\left(p,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)} \tag{9.74}$$

を得る。これを(9.54)に戻して、同時に $\delta(q_k-q_{k-1})$ に(9.71)用いて

$$\begin{aligned}\langle q_k(t_k) | q_{k-1}(t_{k-1})\rangle &= \delta(q_k-q_{k-1}) - i\frac{\varepsilon}{\hbar}\langle q_k | \hat{H} | q_{k-1}\rangle + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \exp\left(i\frac{p(q_k-q_{k-1})}{\hbar}\right)\left[1-i\frac{\varepsilon}{\hbar}H\left(p,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right]+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\end{aligned} \tag{9.75}$$

であるが、$1+x$ を元の $1+x \to \exp(x)$ と見做して、

$$\langle q_k(t_k) | q_{k-1}(t_{k-1})\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp \exp\left(i\left[\frac{p(q_k-q_{k-1})}{\hbar}-\frac{\varepsilon}{\hbar}H\left(p,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right]\right)+\mathcal{O}(\varepsilon^2) \tag{9.76}$$

と計算できる。従って、$F(q't';qt) = \langle q'(t') | q(t)\rangle$ は、(9.52)よりを代入して

$$\begin{aligned}\langle q'(t') | q(t)\rangle &= \int\prod_{i=1}^{n} dq_i \prod_{k=1}^{n+1}\langle q_k(t_k) | q_{k-1}(t_{k-1})\rangle \\ &= \int\prod_{i=1}^{n} dq_i \prod_{k=1}^{n+1}\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp_k \exp\left(\frac{i}{\hbar}\left[p_k(q_k-q_{k-1})-\varepsilon H\left(p_k,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right]\right)+\mathcal{O}(\varepsilon^2)\end{aligned} \tag{9.77}$$

➢ (9.76)の定積分（$\int dp$ は $\int_{-\infty}^{\infty} dp$ の事である）の積分変数はどういう記号でも良いので、で dp_k に替えて代入する：

$$\langle q_k(t_k)|q_{k-1}(t_{k-1})\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dp_k \exp\left(i\left[\frac{p_k(q_k-q_{k-1})}{\hbar}-\frac{\varepsilon}{\hbar}H\left(p_k,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right]\right)+\mathscr{O}(\varepsilon^2)$$

である。最終的には、

$$\varepsilon \to 0 \tag{9.78}$$

の極限、つまり、(9.48)より

$$\varepsilon = \frac{t'-t}{n+1} \Rightarrow n \to \infty \tag{9.79}$$

を求める。その時、$\mathscr{O}(\varepsilon^2)$ が消えて

$$\langle q'(t')|q(t)\rangle = \lim_{n\to\infty}\int\prod_{i=1}^{n}dq_i\int\prod_{j=1}^{n+1}\frac{dp_j}{2\pi\hbar}\exp\left(\frac{i}{\hbar}\sum_{k=1}^{n+1}\left[p_k(q_k-q_{k-1})-\frac{t'-t}{n+1}H\left(p_k,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right]\right) \tag{9.80}$$

を得る。ここに、

$$\prod_{k=1}^{n+1}\exp(a_k)=\exp\left(\sum_{k=1}^{n+1}a_k\right) \Leftrightarrow e^{a_2}\cdots e^{a_n}e^{a_{n+1}} = e^{a_1+a_2+\cdots+a_n+a_{n+1}} \tag{9.81}$$

の性質を用いて、積を和に変換している。

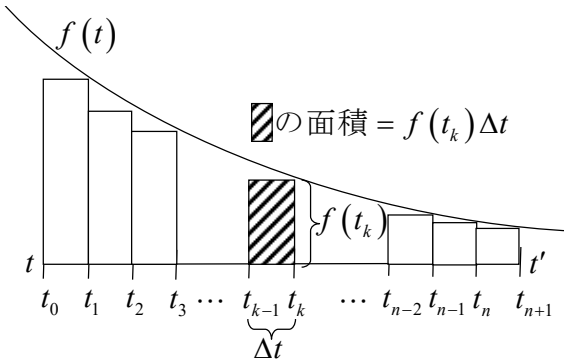
$n\to\infty$ によって、無限小の区間が現れるので、区分求積法に照らし合わせて、和 $\sum_{k=1}^{n+1}\left[p_k(q_k-q_{k-1})-\frac{t'-t}{n+1}H\left(p_k,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right]$ を積分に変換することができる。そこで、

$$\Delta t = \frac{t'-t}{n+1} \to 0 \ (n\to\infty) \tag{9.82}$$

を用いて

$$\sum_{k=1}^{n+1}\left[p_k(q_k-q_{k-1})-\frac{t'-t}{n+1}H\left(p_k,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right]=\sum_{k=1}^{n+1}\left[p_k\frac{q_k-q_{k-1}}{\Delta t}-H\left(p_k,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right]\Delta t \tag{9.83}$$

である。区分求積法とは、図のように



微小な区間の面積の和を求めて全体の面積、つまり定積分、を求める方法である。図より

$$\int_t^{t'} f(t)\,dt = \lim_{n\to\infty}\sum_{k=1}^{n+1} f(t_k)\Delta t \tag{9.84}$$

である。従って、

$$\lim_{n\to\infty}\sum_{k=1}^{n+1}\left[p_k\frac{q_k-q_{k-1}}{\Delta t}-H\left(p_k,\frac{q_k+q_{k-1}}{2}\right)\right]\Delta t=\int_t^{t'}\left(p\frac{dq}{dt}-H(p,q)\right)dt \tag{9.85}$$

を得る。区分求積法からも分かるように、$q(t)$は一連のデータ数値として導入され

$$q(t)=q,\ q(t_1)=q_1,\ q(t_2)=q_2\cdots q(t_{n-1})=q_{n-1},\ q(t_n)=q_n,\ q(t')=q' \tag{9.86}$$

を満たす連続関数になる。ここに、$n\to\infty$のとき

$$\lim_{n\to\infty}\frac{q_k+q_{k-1}}{2}=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{q(t_{k-1}+\Delta t)+q(t_{k-1})}{2}=q(t)\Big|_{t=t_{k-1}}\to q(t) \tag{9.87}$$

$$\lim_{n\to\infty}\frac{q_k-q_{k-1}}{\Delta t}=\lim_{\Delta t\to 0}\frac{q(t_{k-1}+\Delta t)-q(t_{k-1})}{\Delta t}=\frac{dq(t)}{dt}\Bigg|_{t=t_{k-1}}\to\frac{dq(t)}{dt} \tag{9.88}$$

の関係を用いた。以上から、

$$\langle q'(t')|q(t)\rangle=\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'}\left(p\frac{dq}{dt}-H(p,q)\right)dt\right) \tag{9.89}$$

- $$\begin{cases}\int\mathcal{D}q=\lim_{n\to\infty}\int\prod_{i=1}^{n}dq_i\\ \int\mathcal{D}p=\lim_{n\to\infty}\int\prod_{j=1}^{n+1}\frac{dp_j}{2\pi\hbar}\end{cases}$$

を得る。一方、ラグランジュ関数$L(q,\dot{q})$ $\left(\dot{q}=\frac{dq}{dt}\right)$ とは、

$$H(p,q)=p\dot{q}-L(q,\dot{q}) \tag{9.90}$$

の関係式（**【問題１８】**一般的にLはtの関数なので、$L(q,\dot{q},t)$である。$\frac{\partial L}{\partial t}=0$の時、ラグランジュの運動方程式を用いて、$E=p\dot{q}-L$で表わせる量が$\frac{dE}{dt}=0$を満たす事を導け。）があるので、

$$\boxed{\langle q'(t')|q(t)\rangle=\int\mathcal{D}q\int\mathcal{D}p\exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_t^{t'}L(p,q)dt\right)} \tag{9.91}$$

- 積分がpとqなので、$L(p,q)$も$L(q,\dot{q})$ではなくpとqの関数のままにしておく

を得る。

Ⅳ.シュレディンガー方程式

最後に、(9.33)の$\psi(q,t)$がシュレディンガー方程式に従う事を導く。今度は、

$$\psi(q,t)=\int dq'\langle q(t)|q'(t_0)\rangle\psi(q',t_0)\Rightarrow\psi(q,t')=\int dq'\langle q(t')|q'(t)\rangle\psi(q',t)$$

の変更をして

$$\psi(q,t')=\int dq'\langle q(t')|q'(t)\rangle\psi(q',t) \tag{9.92}$$

を用いる。シュレディンガー方程式を導くには、

$$\langle q(t')|q'(t)\rangle=\langle q(t'-t)|q'(0)\rangle \tag{9.93}$$

の関係を用いて（**【問題１９】**(9.93)を導け。）、

$$\psi(q,t')=\int dq'\langle q(t'-t)|q'(0)\rangle\psi(q',t) \tag{9.94}$$

に変形する。ここで、

$$t'=t+\varepsilon\ \ (\varepsilon\ll 1) \tag{9.95}$$

である時、

$$\langle q(t'-t)|q'(0)\rangle=\langle q(\varepsilon)|q'(0)\rangle \tag{9.96}$$

である。つまり、

$$\psi(q,t+\varepsilon)=\int dq'\langle q(\varepsilon)|q'(0)\rangle\psi(q',t) \tag{9.97}$$

である。

まず、(9.97)の$\psi(q,t+\varepsilon)$のテーラー展開より

$$\psi(q,t')=\psi(q,t+\varepsilon)=\psi(q,t)+\varepsilon\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t)+\mathcal{O}(\varepsilon^2) \tag{9.98}$$

である。一方、

$$\langle q(\varepsilon)|q'(0)\rangle=\langle q|\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\varepsilon\right)|q'\rangle$$

なので、$\exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\varepsilon\right)$のマクローリン展開より、(9.54)と同様に

$$\langle q(\varepsilon)|q'(0)\rangle=\delta(q-q')-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\langle q|\hat{H}|q'\rangle+\mathcal{O}(\varepsilon^2) \tag{9.99}$$

なので、(9.26)に代入し

$$\psi(q,t+\varepsilon)=\psi(q,t)-i\frac{\varepsilon}{\hbar}\int\langle q|\hat{H}|q'\rangle dq'\psi(q',t)+\mathscr{O}(\varepsilon^2) \tag{9.100}$$

を得る（**【問題２０】**(9.100)を導け）。(9.98)と(9.100)から、

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t)=\int\langle q|\hat{H}|q'\rangle dq'\psi(q',t) \tag{9.101}$$

が導かれる。ここで、$\hat{H}$ は $\hat{p},\hat{q}$ の関数：$\hat{H}(\hat{p},\hat{q})$ であるので、(9.70)より

$$\langle q|H(\hat{p},\hat{q})|q'\rangle\psi(q',t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dpH\left(p,\frac{q+q'}{2}\right)\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)\psi(q',t) \tag{9.102}$$

である。

$H(\hat{p},\hat{q})$ として、(9.55)の $\hat{H}=\frac{\hat{p}^2}{2m}+U(\hat{q})$ を用いる。その時、(9.102)は、

$$\langle q|H(\hat{p},\hat{q})|q'\rangle\psi(q',t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\left(\frac{p^2}{2m}+U\left(\frac{q+q'}{2}\right)\right)\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)\psi(q',t)$$

である。ここで

$$\frac{\partial}{\partial q'}\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)=-\frac{i}{\hbar}p\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right) \tag{9.103}$$

に着目すれば

$$p^2\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)=\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)^2\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right) \tag{9.104}$$

と書き換えることができるので、(9.102)は

$$\langle q|H(\hat{p},\hat{q})|q'\rangle\psi(q',t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\left[\int dp\left(\frac{1}{2m}\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)^2+U\left(\frac{q+q'}{2}\right)\right)\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)\right]\psi(q',t) \tag{9.105}$$

になる。最終的に求める量は、(9.101)の $\int\langle q|\hat{H}|q'\rangle dq'\psi(q',t)$ の q' の積分である。q' の積分内の(9.105)は、

$$\int dq'\langle q|H(\hat{p},\hat{q})|q'\rangle\psi(q',t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dq'\left[\int dp\left(\frac{1}{2m}\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)^2+U\left(\frac{q+q'}{2}\right)\right)\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)\right]\psi(q',t) \tag{9.106}$$

であり、$\frac{\partial}{\partial q'}$ は $\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)$ に掛かる微分であるが、q' の部分積分を 2 回適用すると、

$\psi(q',t)$ への微分に移る。特に、波動関数は無限遠方で消える：

$$\psi(\pm\infty,t)=0 \tag{9.107}$$

であるので、部分積分後に

$$\int dq'\left[\int dp\left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)^2\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)\right]\psi(q',t)=\int dq'\left[\int dp\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)\right]\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)^2\psi(q',t) \tag{9.108}$$

を得る（**【問題２１】**部分積分を実行し(9.108)を導け）。(9.105)に代入して、

$$\langle q|H(\hat{p},\hat{q})|q'\rangle\psi(q',t)=\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)\left(\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)^2+U\left(\frac{q+q'}{2}\right)\right)\psi(q',t) \tag{9.109}$$

であるが、$\frac{1}{2\pi\hbar}\int dp\exp\left(i\frac{p(q-q')}{\hbar}\right)$ が、(9.71)よりデルタ関数に等しいので

$$\langle q|H(\hat{p},\hat{q})|q'\rangle\psi(q',t)=\delta(q-q')\left(\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q'}\right)^2+U\left(\frac{q+q'}{2}\right)\right)\psi(q',t) \tag{9.110}$$

を得る。(9.101)に代入して、q' 積分実行後、微分方程式として

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t)=\left(\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q}\right)^2+U(q)\right)\psi(q,t)} \tag{9.111}$$

のシュレディンガー方程式が導かれる（**【問題２２】**(9.111)を導け）。結果として

$$\hat{p}\to\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q} \tag{9.112}$$

の置き換えが導かれ、

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q,t)=H(p,q)\psi(q,t)\Leftarrow H(p,q)=\frac{p^2}{2m}+U(q)} \tag{9.113}$$

で与えられるので、ハミルトニアンはニュートン力学の全エネルギーでよい。ニュートン力学（物理量は**実数**）から経路積分の結果、量子力学（物理量は**演算子**）と同等になる。