

相互作用描像

相互作用があるときに使われる描像である相互作用描像を見ていきます。
演算子にハットを付けていません。

ここでは散乱計算で使われる相互作用描像を作ります。わざわざ新しい描像を作るのは、ほとんどの問題は厳密に解けないので、近似計算に合った方法が必要だからです。

粒子の運動はハミルトニアン H に従うとし、 H は相互作用のない粒子を記述する H_0 と相互作用 (ポテンシャル) を表す V の和になっているとします。まずは、「シュレーディンガー方程式とハイゼンベルク方程式」での話から見ておきます。ある時間 t_0 での状態 $|\psi; t_0\rangle$ から時間 t での状態 $|\psi; t\rangle$ への時間発展は、ユニタリー演算子 $U(t, t_0)$ ($U^\dagger = U^{-1}$) によって

$$|\psi; t\rangle = U(t, t_0)|\psi; t_0\rangle \quad (U(t_0, t_0) = 1)$$

と与えられ、 U は時間発展演算子と呼ばれます。ユニタリー演算子にするのは

$$\langle\psi; t|\psi; t\rangle = \langle\psi; t_0|U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)|\psi; t_0\rangle = \langle\psi; t_0|\psi; t_0\rangle$$

とするためです (また、ユニタリー演算子なら U^{-1} が存在するので $|\psi; t\rangle$ と $|\psi; t_0\rangle$ が一意的に対応する)。シュレーディンガー方程式に入れれば、 t_0 は固定されているとして

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi; t\rangle &= H|\psi; t\rangle \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0)|\psi; t_0\rangle &= HU(t, t_0)|\psi; t_0\rangle \\ i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} |\psi; t_0\rangle &= HU(t, t_0)|\psi; t_0\rangle \\ i\hbar \frac{\partial U(t, t_0)}{\partial t} &= HU(t, t_0) \end{aligned} \tag{1}$$

となり、 U は

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} \quad (U(t_0, t_0) = 1)$$

と求まります。 $U(t, t')U(t', t_0)$ は

$$U(t, t')U(t', t_0)|\psi; t_0\rangle = U(t, t')|\psi; t'\rangle = |\psi; t\rangle$$

なので、 $U(t, t')U(t', t_0) = U(t, t_0)$ です。また、 $U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0) = 1$ から

$$|\psi; t_0\rangle = U^\dagger(t, t_0)U(t, t_0)|\psi; t_0\rangle = U^\dagger(t, t_0)|\psi; t\rangle = U(t_0, t)|\psi; t\rangle$$

となり、 $U^\dagger(t, t_0) = U^{-1}(t, t_0) = U(t_0, t)$ です。

状態に時間依存性があるときはシュレーディンガー描像、演算子に時間依存性があるときはハイゼンベルク描像と呼ばれます。 $|\psi; t\rangle$ はシュレーディンガー描像なので状態と演算子は $|\psi; t\rangle_S$, A_S と表記します。ハイゼンベルク描像での状態 $|\psi\rangle$ は時間依存がないので $(|\psi\rangle_H)$ とするとハミルトニアンと紛らわしいので省きます)、時間発展演算子によって

$$|\psi; t\rangle_S = U(t, t_0)|\psi\rangle, |\psi\rangle = U(t_0, t)|\psi; t\rangle_S = U^\dagger(t, t_0)|\psi; t\rangle_S$$

という関係になります。 $|\psi\rangle$ は時間 t_0 での状態 $|\psi; t_0\rangle_S$ に対応します。シュレーディンガー描像の演算子 A_S は時間依存性を持ちませんが、ハイゼンベルク描像では持ちます。 A_S の作用を

$$A_S|\psi; t\rangle_S = |\psi'; t\rangle_S$$

とすれば

$$A_S|\psi; t\rangle_S = A_S U(t, t_0)|\psi'; t_0\rangle_S$$

$$U^\dagger(t, t_0)A_S|\psi; t\rangle_S = U^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0)|\psi'; t_0\rangle_S$$

$$U^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0)|\psi\rangle = A'(t)|\psi'\rangle$$

よって

$$A'(t) = U^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0)$$

となり、 $A'(t)$ がハイゼンベルク描像での演算子です。ハミルトニアン演算子は

$$H' = U^\dagger(t, t_0)H U(t, t_0) = e^{iH(t-t_0)/\hbar} H e^{-iH(t-t_0)/\hbar} = H e^{iH(t-t_0)/\hbar} e^{-iH(t-t_0)/\hbar} = H$$

となり、どちらの描像でも同じです。

シュレーディンガー描像とハイゼンベルク描像はユニタリー変換で繋がっているので、結果を変えません。例えば、演算子の期待値は、 $t_0 = 0$ として

$$\begin{aligned} \langle \psi | A'(t) | \psi \rangle &= {}_S \langle \psi; t | U(t) A(t) U^\dagger(t) | \psi; t \rangle_S = {}_S \langle \psi; t | U(t) U^\dagger(t) A U(t) U^\dagger(t) | \psi; t \rangle_S \\ &= {}_S \langle \psi; t | A_S | \psi; t \rangle_S \end{aligned}$$

となって一致します。

このように、2つの描像はハミルトニアン H で記述されています。しかし、 H_0 だけなら扱えますが、 V があると大抵の問題でまともに扱えなくなります。なので、 V がうまく分離できるような描像を作ります。

H_0 を使って、シュレーディンガー描像とハイゼンベルク描像の関係と同じように

$$|\psi; t\rangle_S = U_0(t, t_0)|\psi; t\rangle_I \quad (U_0 = e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar})$$

$$A_I = U_0^\dagger(t, t_0)A_S U(t, t_0)$$

とします。 $|\psi; t\rangle_I$ を相互作用描像 (interaction picture)、もしくは朝永描像やディラック描像と呼びます。相互作用描像では状態、演算子の両方が時間依存性を持ちます。 U_0 はシュレーディンガー描像と相互作用描像を繋いでいるだけなので、相互作用描像の時間発展演算子ではありません。 U_0 の微分方程式は、シュレーディンガー方程式から U と同じように

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi; t\rangle_S = H |\psi; t\rangle_S$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_0(t, t_0) |\psi; t_0\rangle_I = H U_0(t, t_0) |\psi; t_0\rangle_I$$

$$i\hbar \frac{\partial U_0(t, t_0)}{\partial t} = H_0 U_0(t, t_0)$$

となります。

ハイゼンベルク描像との対応は

$$|\psi; t\rangle_I = U_0^\dagger(t, t_0) |\psi; t\rangle_S = U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) |\psi\rangle$$

$$A_I(t) = U_0^\dagger(t, t_0) A_S U(t, t_0) = U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t_0) A'(t) U^\dagger(t, t_0) U_0(t, t_0)$$

また、期待値は

$${}_I \langle \psi; t | A_I | \psi; t \rangle_I = {}_S \langle \psi; t | U_0 A_I U_0^\dagger | \psi; t \rangle_S = {}_S \langle \psi; t | U_0 U_0^\dagger A_S U_0 U_0^\dagger | \psi; t \rangle_S = {}_S \langle \psi; t | A_S | \psi; t \rangle_S$$

なので、他の描像と一致します。

状態 $|\psi; t\rangle_I$ を時間微分すると

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi; t\rangle_I &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (U_0^\dagger(t, t_0) |\psi; t\rangle_S) \\ &= -H_0 U_0^\dagger |\psi; t\rangle_S + U_0^\dagger i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi; t\rangle_S \\ &= -U_0^\dagger H_0 |\psi; t\rangle_S + U_0^\dagger H |\psi; t\rangle_S \\ &= U_0^\dagger (H - H_0) |\psi; t\rangle_S \\ &= U_0^\dagger(t, t_0) V U_0(t, t_0) |\psi; t\rangle_I \\ &= V_I(t) |\psi; t\rangle_I \end{aligned}$$

となり、状態の時間変化は相互作用部分によります。 A_I の時間微分は

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} A_I(t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (U_0^\dagger(t, t_0) A_S U_0(t, t_0)) \\
&= -H_0 U_0^\dagger A_S U_0 + U_0^\dagger A_S H_0 U_0 \\
&= -H_0 U_0^\dagger A_S U_0 + U_0^\dagger A_S U_0 H_0 \\
&= -H_0 A_I(t) + A_I(t) H_0 \\
&= [A_I(t), H_0]
\end{aligned}$$

となり、 H_0 によるハイゼンベルク方程式になります。これが相互作用描像の特徴で、状態は V 、演算子は H_0 によって記述されます。

相互作用描像での時間 t' から t への時間発展は

$$\begin{aligned}
|\psi; t\rangle_I &= U_0^\dagger(t, t_0) |\psi; t\rangle_S = U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t') |\psi; t'\rangle_S = U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t') U_0(t', t_0) |\psi; t'\rangle_I \\
&= U_I(t, t') |\psi; t'\rangle_I
\end{aligned} \tag{2}$$

となるので、相互作用描像での時間発展演算子 U_I は

$$U_I(t, t') = U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t') U_0(t', t_0)$$

と与えられます。 $U(t, t_0)$ は

$$U(t, t_0) = e^{-iH(t-t_0)/\hbar}$$

なので

$$U_I(t, t') = e^{iH_0(t-t_0)/\hbar} e^{-iH(t-t')/\hbar} e^{-iH_0(t'-t_0)/\hbar}$$

そして、 U_I は U と同じ関係を持ち

$$U_I(t, t) = 1$$

$$U_I(t, t_1) U_I(t_1, t_0) = U_I(t, t_0)$$

$$U_I^\dagger(t, t_0) = U_I(t_0, t)$$

となっています。 U_I が求めれば時間発展を記述出来ます。

というわけで、 U_I を求めます。 U_I を時間微分すると

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_I(t, t') &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t') U_0(t', t_0)) \\
&= -H_0 U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t') U_0(t', t_0) + U_0^\dagger(t, t_0) H U(t, t') U_0(t', t_0) \\
&= -U_0^\dagger(t, t_0) H_0 U(t, t') U_0(t', t_0) + U_0^\dagger(t, t_0) H U(t, t') U_0(t', t_0) \\
&= U_0^\dagger(t, t_0) (H - H_0) U(t, t') U_0(t', t_0) \\
&= U_0^\dagger(t, t_0) V U(t, t') U_0(t', t_0) \\
&= U_0^\dagger(t, t_0) V U_0(t, t_0) U_0^\dagger(t, t_0) U(t, t') U_0(t', t_0) \\
&= V_I(t) U_I(t, t')
\end{aligned}$$

V が時間依存していなくても V_I は時間依存します。これを t' から t で積分すると

$$\begin{aligned}
i\hbar \int_{t'}^t dt_1 \frac{\partial U(t_1, t')}{\partial t_1} &= \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) U_I(t_1, t') \\
U_I(t, t') - U_I(t', t') &= \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) U_I(t_1, t')
\end{aligned}$$

左辺の第二項は 1 なので

$$U_I(t, t') = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) U_I(t_1, t')$$

これは厳密に解けないので、「パウリの黄金律」で見たような逐次法を使います。第一項を展開の最低次として

$$U_I^{(0)}(t, t') = 1$$

とすれば、次の近似形として

$$U_I^{(1)}(t, t') = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) U_I^{(0)}(t_1, t') = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1)$$

$U_I^{(1)}$ を入れれば、次の近似形として

$$\begin{aligned}
U_I^{(2)}(t, t') &= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) U_I^{(1)}(t_1, t') \\
&= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) \left(1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^{t_1} dt_2 V_I(t_2)\right) \\
&= 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) \int_{t'}^{t_1} dt_2 V_I(t_2)
\end{aligned}$$

このようにどこまでも続いていき、ノイマン級数 (Neumann series) と呼ばれます。 $U_I^{(n)}$ は

$$U_I^{(n)}(t, t') = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) + \cdots + \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) \int_{t'}^{t_1} dt_2 V_I(t_2) \cdots \int_{t'}^{t_{n-1}} dt_n V_I(t_n) \quad (3)$$

積分上限は $t, t_1, t_2, \dots, t_{n-1}$ と並んでいるので、積分の実行において $t > t_1 > t_2 > \dots > t_{n-1}$ となっています。このように、逐次近似で U_I が求まります。

注意すべきなのは、 V_I は演算子で V_I 同士は交換しないことです。これは

$$V_I(t) = U_0^\dagger(t, t_0) V U_0(t, t_0)$$

から

$$\begin{aligned} V_I(t_1) V_I(t_2) &= U_0^\dagger(t_1, 0) V U_0(t_1, 0) U_0^\dagger(t_2, 0) V U_0(t_2, 0) \\ &= e^{iH_0 t_1/\hbar} V e^{-iH_0 t_1/\hbar} e^{iH_0 t_2/\hbar} V e^{-iH_0 t_2/\hbar} \\ &= e^{iH_0 t_1/\hbar} V e^{-iH_0(t_1-t_2)/\hbar} V e^{-iH_0 t_2/\hbar} \\ &= \left(1 + \frac{i}{\hbar} H_0 t_1 + \cdots\right) V \left(1 - \frac{i}{\hbar} H_0(t_1 - t_2) + \cdots\right) V \left(1 - \frac{i}{\hbar} H_0 t_2 + \cdots\right) \\ &= \left(V^2 + \frac{i}{\hbar} H_0 V^2 t_1 - \frac{i}{\hbar} V H_0 V(t_1 - t_2) + \cdots\right) \left(1 - \frac{i}{\hbar} H_0 t_2 + \cdots\right) \\ &= \left(V^2 + \frac{i}{\hbar} H_0 V^2 t_1 - \frac{i}{\hbar} V H_0 V t_1 + \frac{i}{\hbar} V H_0 V t_2 + \cdots\right) \left(1 - \frac{i}{\hbar} H_0 t_2 + \cdots\right) \\ &= V^2 + \frac{i}{\hbar} [H_0, V] V t_1 + \frac{i}{\hbar} V [H_0, V] t_2 + \cdots \end{aligned}$$

そして、 $V_I(t_2) V_I(t_1)$ では

$$V_I(t_2) V_I(t_1) = V^2 + \frac{i}{\hbar} V [H_0, V] t_1 + \frac{i}{\hbar} [H_0, V] V t_2 + \cdots$$

なので、 $V_I(t_1) V_I(t_2) \neq V_I(t_2) V_I(t_1)$ です。

(3) をもっと扱いやすい形にします。そのために、2次元面上の積分

$$\int_0^a dx \int_0^x dy f(x) f(y) \quad (4)$$

を見ておきます。 $f(x), f(y)$ は自由に交換できないとします。 y の積分範囲には $y = x$ の制限があり、積分領域は直角三角形です。つまり、 $x = a_1$ では $y = a_1, \dots, x = a$ では $y = a$ となります。積分領域を変えなければ積分結果は同じなので、逆にして $y = a_i$ では $x = a_i$ と見ることにすれば

$$\int_0^a dx \int_0^x dy f(x) f(y) = \int_0^a dy \int_y^a dx f(x) f(y)$$

積分変数の記号は勝手につけたものなので

$$\int_0^a dy \int_y^a dx f(x)f(y) = \int_0^a dx \int_x^a dy f(y)f(x) \quad (5)$$

左辺は $x > y$ での積分なので、ヘヴィサイドの階段関数

$$\Theta(x-y) = \begin{cases} 1 & (x > y) \\ 0 & (x < y) \end{cases} \quad (6)$$

によって

$$\begin{aligned} & \int_0^a dy \int_0^a dx \Theta(x-y)f(x)f(y) \\ &= \int_0^a dy \int_0^y dx \Theta(x-y)f(x)f(y) + \int_0^a dy \int_y^a dx \Theta(x-y)f(x)f(y) \\ &= \int_0^a dy \int_y^a dx f(x)f(y) \end{aligned}$$

と書けます。(5)の右辺でも同様なので

$$\begin{aligned} \int_0^a dy \int_y^a dx f(x)f(y) &= \int_0^a dy \int_0^a dx \Theta(x-y)f(x)f(y) \\ \int_0^a dx \int_x^a dy f(y)f(x) &= \int_0^a dx \int_0^a dy \Theta(y-x)f(y)f(x) \end{aligned}$$

よって、(4)は

$$\begin{aligned} \int_0^a dx \int_0^x dy f(x)f(y) &= \frac{1}{2} \left(\int_0^a dy \int_y^a dx f(x)f(y) + \int_0^a dx \int_x^a dy f(y)f(x) \right) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^a dx \int_0^a dy (\Theta(x-y)f(x)f(y) + \Theta(y-x)f(y)f(x)) \end{aligned}$$

括弧内を

$$\begin{aligned} \mathbb{T}[f(x)f(y)] &= \Theta(x-y)f(x)f(y) + \Theta(y-x)f(y)f(x) \\ &= \begin{cases} f(x)f(y) & (x > y) \\ f(y)f(x) & (y < x) \end{cases} \end{aligned}$$

と表記します。 x, y を時間したとき \mathbb{T} は時間順序積と呼ばれ、時間の大きい順番に並べる表記です。
今の結果は、 $f(x)f(y)f(z)$ のように増えていくと、並びの入れ替えに対応して

$$f(x)f(y)f(z), f(x)f(z)f(y), f(y)f(x)f(z), f(y)f(z)f(x), f(z)f(x)f(y), f(z)f(y)f(x)$$

として出てき、時間順序積とは

$$\begin{aligned} \mathbb{T}[f(x)f(y)f(z)] &= \Theta(x-y)\Theta(y-z)f(x)f(y)f(z) \\ &\quad + \Theta(x-z)\Theta(z-y)f(x)f(z)f(y) \\ &\quad + \Theta(y-x)\Theta(x-z)f(y)f(x)f(z) \\ &\quad + \Theta(y-z)\Theta(z-x)f(y)f(z)f(x) \\ &\quad + \Theta(z-x)\Theta(x-y)f(z)f(x)f(y) \\ &\quad + \Theta(z-y)\Theta(y-x)f(z)f(y)f(x) \end{aligned}$$

と対応します。なので

$$\int_0^a dx \int_0^x dy \int_0^y dz f(x)f(y)f(z) = \frac{1}{3!} \int_0^a dx \int_0^a dy \int_0^a dz \mathbb{T}[f(x)f(y)f(z)]$$

となり、 n 個では

$$\begin{aligned} &\int_0^a dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \cdots \int_0^{x_{n-1}} dx_n f(x_1)f(x_2) \cdots f(x_n) \\ &= \frac{1}{n!} \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 \cdots \int_0^a dx_n \mathbb{T}[f(x_1)f(x_2) \cdots f(x_n)] \end{aligned}$$

時間順序積は x_1, x_2, \dots, x_n の大小関係による $n!$ 個の組み合わせの和で

$$\begin{aligned} \mathbb{T}[f(x_1)f(x_2) \cdots f(x_n)] &= \Theta(x_1 - x_2) \cdots \Theta(x_{n-1} - x_n) f(x_1)f(x_2) \cdots f(x_n) + \cdots \\ &= \sum_P \Theta(x_{p(1)} - x_{p(2)}) \cdots \Theta(x_{p(n-1)} - x_{p(n)}) f(x_{p(1)})f(x_{p(2)}) \cdots f(x_{p(n)}) \end{aligned}$$

のように表記されます。 p は可能な置換を表し (例えば $p(1) = 2, p(2) = 1$)、それによる和を取れということですから。今の話を単純にまとめれば、各 x_i の積分の制限を階段関数にし

$$\begin{aligned} &\int_0^a dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \cdots \int_0^{x_{n-1}} dx_n f(x_1)f(x_2) \cdots f(x_n) \\ &= \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 \cdots \int_0^a dx_n \Theta(x_1 - x_2)\Theta(x_2 - x_3) \cdots \Theta(x_{n-1} - x_n) f(x_1)f(x_2) \cdots f(x_n) \end{aligned}$$

変数の入れ替えに対する置換を足し合わせて

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n!} \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 \cdots \int_0^a dx_n \sum_P \Theta(x_{p(1)} - x_{p(2)}) \cdots \Theta(x_{p(n-1)} - x_{p(n)}) f(x_{p(1)}) f(x_{p(2)}) \cdots f(x_{p(n)}) \\ &= \frac{1}{n!} \int_0^a dx_1 \int_0^a dx_2 \cdots \int_0^a dx_n \text{T}[f(x_1) f(x_2) \cdots f(x_n)] \end{aligned}$$

としたということです。

これを (3) に使えば

$$U_I^{(n)}(t, t') = 1 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t'}^t dt_1 V_I(t_1) + \cdots + \frac{1}{n!} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \int_{t'}^t dt_1 \int_{t'}^t dt_2 \cdots \int_{t'}^t dt_n \text{T}[V_I(t_1) V_I(t_2) \cdots V_I(t_n)]$$

exp の展開の形になっているので、級数は

$$U_I(t, t') = \text{T}\left[\exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t ds V_I(s)\right]\right]$$

とまとめられます。

この結果が散乱計算のどこで出てくるのかは、簡単に言えば

$$|\psi; \infty\rangle_I = S|\psi; -\infty\rangle_I$$

として出てきます。S は S 行列演算子と呼ばれ、散乱に関する情報を持つ演算子で、散乱計算の中心にいる重要な演算子です。(2) から、S 行列演算子は U_I の無限大の極限として

$$S = \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{t' \rightarrow -\infty} U_I(t, t')$$

と与えられます。なので、相互作用描像は散乱計算に適した描像となっています。S 行列は「S 行列」で触れます。

・補足

シュレーディンガー方程式でのハミルトニアン演算子が時間依存しているとした場合でのハイゼンベルク方程式を示しておきます。時間依存するハミルトニアン演算子によるシュレーディンガー方程式は

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi; t\rangle = H(t) |\psi; t\rangle$$

ただし、 $H(t)$ は時間依存する係数 $c_i(t)$ と時間依存しないシュレーディンガー描像の演算子 O_i^S によって

$$H(t) = \sum_i c_i(t) O_i^S$$

と展開できると考え、時間依存性は c 数が持ち、演算子にはないようにします。

このときのシュレーディンガー描像での時間発展は、全ハミルトニアン $H(t)$ による時間発展演算子 U によって

$$|\psi; t\rangle_S = U(t, t_0) |\psi; t_0\rangle_S, \quad {}_S\langle\psi; t| = {}_S\langle\psi; t_0| U^\dagger(t, t_0)$$

そうすると、 U の時間微分は (1) から

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t_0) &= H(t)U(t, t_0) \\ -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U^\dagger(t, t_0) &= U^\dagger(t, t_0)H(t) \end{aligned}$$

これから、 $U(t, t')$ は、 U_I での V_I を $H(t)$ に置き換えて $(H(t_1), H(t_2), \dots)$ が交換するとは限らない

$$U(t, t') = \mathbb{T} \left[\exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{t'}^t ds H(s) \right] \right]$$

実際に、 t で微分すれば

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} U(t, t') = H(t) \mathbb{T} \left[\exp \left[-i \int_{t'}^t ds H(s) \right] \right] = H(t)U(t, t')$$

この U によって演算子 O は時間発展するので、ハイゼンベルク描像 (添え字 H を付けます)

$$O_H(t) = U^\dagger(t, t_0) O_S U(t, t_0)$$

では

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_H(t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (U^\dagger(t, t_0) O_S U(t, t_0)) \\ &= i\hbar \left(\frac{\partial}{\partial t} U^\dagger \right) O_S U + i\hbar U^\dagger O_S \frac{\partial}{\partial t} U \\ &= -U^\dagger(t, t_0) H(t) O_S U(t, t_0) + U^\dagger(t, t_0) O_S H(t) U(t, t_0) \\ &= -U^\dagger(t, t_0) H(t) U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) O_S U(t, t_0) + U^\dagger(t, t_0) O_S U(t, t_0) U^\dagger(t, t_0) H(t) U(t, t_0) \\ &= -H_H(t) O_H(t) + O_H(t) H_H(t) \\ &= [O_H(t), H_H(t)] \end{aligned}$$

となります ($U(t, t_0)$ は $H(t_1), H(t_2)$ とかを含むので $H(t)$ と交換するとは限らない)。ハイゼンベルク描像でのハミルトニアン演算子 $H_H(t)$ は、 $H(t)$ の展開と演算子への時間発展演算子 U の作用によって

$$H_H(t) = \sum_i c_i(t) O_i^H(t)$$

となって、 c 数だけでなく演算子も時間依存性を持ちます。