国広悌二著「量子力学」(東京図書、2018年9月) 3章への補遺：
演算子の積の順序：Weyl 順序、Weyl 対応

国広悌二 (2018年10月改訂)

1 はじめに

古典力学におけるある物理量 $A(q, p)$ 正準座標 q と正準運動量 p を用いて表されているとき、量子力学における演算子 $\hat{A}$ は一意的には定まらない。それは $\hat{q}$ と $\hat{p}$ が可換ではなくその順序による不定性が存在するからである。その順序を決める有用な処方が Weyl(ワイル) によって提案されている。それは「**Weyl 対応**」と呼ばれる。この対応の処方は量子演算子が与えられたときの**「位相空間表示」**を与えるとともに、古典的物理量に対応する量子力学的演算子の形、特に、演算子 $\hat{q}$ と $\hat{p}$ の順序を一意的に定める。それは、経路積分で重要な役割を果たす「中点処方」を自然に導くなど量子論において本質的な有効性を有している。[1]。

まず最初の節では、直角座標を取る場合について位相空間表示と Weyl 対応について基本的な事項を説明する。曲線座標を取る場合、あるいは、曲がった時空を取る場合は次節で説明する。

2 Weyl 対応：直角座標の場合

まず、直角座標系（デカルト座標系）の場合を扱う。

2.1 密度演算子と特性演算子

特に断らない限り、1自由度の純粋状態を考え、空間の次元を1次元とする。多次元系、多自由度への拡張は自明である:D 次元 N 体系の場合は以下の表式において、$q = (q_1^{(1)}, q_2^{(1)}, \ldots, q_D^{(1)}, q_1^{(2)}, q_2^{(2)}, \ldots, q_D^{(2)}, \ldots, q_1^{(N)}, q_2^{(N)}, \ldots, q_D^{(N)})$ とすればよい。他の変数も同様である。

状態ベクトル $|\psi(t)\rangle$ についての期待値を表現するのに便利なので次の演算子を導入する:

$$\hat{\rho}(t) \equiv |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)| \tag{2.1}$$

これを「**密度演算子**」、あるいは、「**密度行列**」と呼ぶ。すると、任意の演算子 $\hat{A}$ の期待値は密度演算子の積とのトレースで表される:

$$\langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle = \mathrm{tr}\,\{\hat{\rho}\hat{A}\}. \tag{2.2}$$

実際、任意の完全系 $\{|n\rangle\}_n$ を用いて、右辺 $= \sum_n \langle n|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|\hat{A}|n\rangle = \sum_n \langle\psi(t)|\hat{A}|n\rangle\langle n|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t)|\hat{A}|\psi(t)\rangle$. ここで、完全性 $\sum_n |n\rangle\langle n| = 1$ を用いた。

[1] より詳しくは、以下の文献を参照：R. Kubo, 'Wigner Representation of Quantum Operators and Its Application to Electrons in a Magnetic Field', J. Phys. Soc. Jap. **19** (1964), 2127; J.E. Moyal, 'Quantum mechanics as a statistical theory', Proc. Camb. Phil. Soc. **45** (1949), 99.

次の演算子を「**特性演算子**」と呼ぶ:

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{U}}(\hat{q},\hat{p};\xi,\eta) &= \mathrm{e}^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})/\hbar}, \\ &= \mathrm{e}^{i\eta\hat{p}/2\hbar}\,\mathrm{e}^{i\xi\hat{q}/\hbar}\,e^{i\eta\hat{p}/2\hbar} = \mathrm{e}^{i\xi\hat{q}/2\hbar}\,\mathrm{e}^{i\eta\hat{p}/\hbar}\,e^{i\xi\hat{q}/2\hbar}. \end{aligned} \tag{2.3}$$

最後の 2 つの等式で国広「量子力学」の (3.91) および (3.92) を用いた [2]。任意の量子状態 $|\psi(t)\rangle$ における $\hat{\mathcal{U}}$ の期待値を「**特性関数**」という:

$$\mathcal{U}(\xi,\eta,t) \equiv \langle\psi(t)|\hat{\mathcal{U}}|\psi(t)\rangle = \mathrm{tr}\,\{\hat{\rho}(t)\hat{\mathcal{U}}\} \tag{2.4}$$

$$\begin{aligned} &= \int dq \int dq'\,\langle\psi(t)|e^{i\eta\hat{p}/2\hbar}|q\rangle\langle q|\mathrm{e}^{i\xi\hat{q}/\hbar}|q'\rangle\langle q'|e^{i\eta\hat{p}/2\hbar}|\psi(t)\rangle \\ &= \int dq\,\langle\psi(t)|q-\eta/2\rangle\,\mathrm{e}^{i\xi q/\hbar}\langle q+\eta/2|\psi(t)\rangle \\ &= \int dq\,\mathrm{e}^{i\xi q/\hbar}\langle q+\eta/2|\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|q-\eta/2\rangle \\ &= \int dq\,\mathrm{e}^{i\xi q/\hbar}\langle q+\eta/2|\hat{\rho}|q-\eta/2\rangle \end{aligned} \tag{2.5}$$

ただし、$e^{i\eta\hat{p}/2\hbar}|q\rangle = |q-\eta/2\rangle$ および $\langle q|\psi\rangle = \psi(q)$ を用いた。Wigner 関数 $\rho_W(q,p,t)$ は密度演算子の位相空間表示として次のように定義される [3]：

$$\rho_W(q,\,p,\,t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\eta\,\mathrm{e}^{-ip\eta/\hbar}\langle q+\eta/2|\hat{\rho}(t)|q-\eta/2\rangle. \tag{2.6}$$

逆変換は、

$$\langle q'|\hat{\rho}(t)|q\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}\,\mathrm{e}^{-ip(q-q')\eta/\hbar}\rho_W((q+q')/2,\,p,\,t). \tag{2.7}$$

最後の表式で q の引数が中点 $(q+q')/2$ になっていることに注意する。

Wigner 関数は実数である：$\rho_W(q,p,t)^* = \rho_W(q,p,t)$. Wigner 関数と特性関数は互いの Fourier 変換である:

$$\rho_W(q,p,t) = \int\!\!\int d\xi\,d\eta\,\mathcal{U}(\xi,\,\eta,\,t)\mathrm{e}^{-i(\xi q+\eta p)/\hbar} \tag{2.8}$$

$$\mathcal{U}(\xi,\,\eta,\,t) = \int\!\!\int \frac{dqdp}{(2\pi\hbar)^2}\,\rho_W(q,p,t)\mathrm{e}^{i(\xi q+\eta p)/\hbar}. \tag{2.9}$$

さらに、(2.8) に (2.4) を代入すると、次の簡潔な表式を得る：

$$\rho_W(q,p,t) = \mathrm{tr}[\hat{\rho}(t)\hat{\Delta}(\hat{q}-q,\,\hat{p}-p)]. \tag{2.10}$$

ここに、次の演算子を定義した：

$$\hat{\Delta}(\hat{q},\,\hat{p}) = \int\frac{d\xi d\eta}{2\pi\hbar}\mathrm{e}^{i(\xi\hat{q}+\eta\hat{p})/\hbar}. \tag{2.11}$$

これは位相空間上のデルタ関数の量子論的対応物である。実際、$\hat{q}$ と $\hat{p}$ が可換であるとすると、$\hat{\Delta}(\hat{q}-q,\,\hat{p}-p) \to 2\pi\hbar\delta(\hat{q}-q)\delta(\hat{p}-p)$ となる。そこで、$\hat{\Delta}(\hat{q},\,\hat{p})$ を以下では**デルタ演算子**と呼ぶことにする。

[2] 以下で国広悌二著「量子力学」（東京図書）の式を引用するときは (3.91:国広) のように書く。

[3] 本来の Wigner 関数は (2.6) を $2\pi\hbar$ で割ったものであるが、ここでは、表記の簡便さのために密度演算子の Weyl 表示を Wigner 関数と呼んでいる。

2.2 Weyl 表示、Weyl 対応

密度演算子の位相空間表示が Wigner 関数 $\rho_W(q,p,t)$ であった。(2.10) に与えらられている Wigner 関数の定義を拡張して、任意の量子力学的演算子 $\hat{A}(\hat{q},\hat{p})$ の位相空間表示 $A_W(q,p)$ を以下のように定義する:

$$
\begin{aligned}
A_W(q,\,p) &= \mathrm{tr}[\hat{A}(\hat{q},\,\hat{p})\hat{\Delta}(\hat{q}-q,\,\hat{p}-p)], && (2.12)\\
&= \int_{-\infty}^{\infty} d\eta\, \mathrm{e}^{-ip\eta/\hbar}\langle q+\eta/2|\hat{A}|q-\eta/2\rangle. && (2.13)
\end{aligned}
$$

これを **Weyl（ワイル) 表示**、あるいは、**Weyl-Wigner 表示**と呼ぶ。上で定義した Wigner 関数は密度演算子の Weyl 表示である。逆変換は、Wigner 関数の場合 (2.7) と同様に、

$$
\langle q'|\hat{A}|q\rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{dp}{2\pi\hbar}\,\mathrm{e}^{-ip(q-q')/\hbar}A_W((q+q')/2,\,p) \tag{2.14}
$$

となる。q の引数が中点 $(q+q')/2$ になっていることに注意する。

たとえば、特性演算子 (2.3) の Weyl 表示 $\mathcal{U}_W(q,\,p;\,\xi,\,\eta)$ は容易に計算できて、

$$
\mathcal{U}_W(q,\,p;\,\xi,\,\eta) = \mathrm{e}^{i(\eta p+\xi q)/\hbar} \tag{2.15}
$$

となる。実際、(2.13) を用いると、

$$
\begin{aligned}
\mathcal{U}_W(q,\,p;\,\xi,\,\eta) &= \int dy\,\mathrm{e}^{-ipy/\hbar}\langle q+y/2|\hat{\mathcal{U}}(\hat{q},\hat{p};\xi,\eta)|q-y/2\rangle\\
&= \int dy\,\mathrm{e}^{-ipy/\hbar}\langle q+y/2|\mathrm{e}^{i\eta\hat{p}/2\hbar}\mathrm{e}^{i\xi\hat{q}/\hbar}\mathrm{e}^{i\eta\hat{p}/2\hbar}|q-y/2\rangle\\
&= \int dy\,\mathrm{e}^{-ipy/\hbar}\langle q+(y+\eta)/2|\mathrm{e}^{i\xi\hat{q}/\hbar}|q-(y+\eta)/2\rangle\\
&= \int dy\,\mathrm{e}^{-ipy/\hbar}\mathrm{e}^{i\xi\{q-(y+\eta)/2\}/\hbar}\delta(y+\eta) = \mathrm{e}^{i(\xi q+\eta p)/\hbar}.
\end{aligned}
$$

任意の演算子の積 $\hat{A}\hat{B}$ の Weyl 表示 $(\hat{A}\hat{B})_W(q,p,t)$ を考えよう。積 $\hat{A}\hat{B}$ の**トレース**については、次の等式が成り立つ：

$$
\mathrm{tr}(\hat{A}\hat{B}) = \int\frac{dq\,dp}{2\pi\hbar}\,A_W(q,p,t)B_W(q,p,t). \tag{2.16}
$$

これは、右辺に (2.13) を代入すれば容易に示すことができる。特に、$\hat{A}$ の期待値を $\rho_W(q,p,t)$ を用いて表すことができる：

$$
\langle\hat{A}\rangle = \mathrm{tr}\hat{\rho}(t)\hat{A} = \int\frac{dqdp}{2\pi\hbar}\,\rho_W(q,p,t)A_W(q,p,t). \tag{2.17}
$$

この表式は Wigner 関数が位相空間上の「**分布関数**」の役割を果たしていることを示している。ただし、ρ_W は (半) 正定値ではなく負の値を取り得るので、「**擬分布関数**」と呼ばれる。なお、$\hat{A}$ が特性演算子 $\hat{\mathcal{U}}$ の場合は、(2.15) を代入して (2.9) が得られる。

演算子 $\hat{A}(\hat{q},\,\hat{p})$ に対して、関数 $\mathcal{A}(\xi,\,\eta)$ を以下のように定義する:

$$
\hat{A}(\hat{q},\,\hat{p}) = \int\!\!\int d\xi\,d\eta\,\mathcal{A}(\xi,\,\eta)\hat{\mathcal{U}}(\hat{q},\,\hat{p};\xi,\eta). \tag{2.18}
$$

両辺の Weyl-Wigner 表示を取って (2.15) を用いると次の表式を得る:

$$A_W(q,p) \;=\; \int\!\!\int d\xi\, d\eta\, \mathcal{A}(\xi,\,\eta)\mathrm{e}^{i(\xi q+\eta p)/\hbar}. \tag{2.19}$$

この逆変換は

$$\mathcal{A}(q,p) \;=\; \int\!\!\int \frac{d\xi\, d\eta}{(2\pi\hbar)^2}\, A_W(q,\,p)\mathrm{e}^{-i(\xi q+\eta p)/\hbar}. \tag{2.20}$$

(2.20) を (2.18) の右辺に代入して、

$$\begin{aligned}\hat{A}(\hat{q},\hat{p}) \;&=\; \int\!\!\int \frac{d\xi\, d\eta\, dq\, dp}{(2\pi\hbar)^2}\, A_W(\xi,\,\eta)\mathrm{e}^{-i(\xi q+\eta p)/\hbar}\hat{\mathcal{U}}(\hat{q},\hat{p};\xi,\eta),\\ &\equiv\; \int\!\!\int \frac{dq\, dp}{2\pi\hbar}\, A_W(\xi,\,\eta)\hat{\Delta}(\hat{q}-q,\,\hat{p}-p)\end{aligned} \tag{2.21}$$

を得る。

一般に、$\hat{A}=T(\hat{p})+V(\hat{q})$ のとき、$A_W(q,p)=T(p)+V(q)$ である。

2.3 Weyl 順序

まず、(3.91:国広) および (3.93:国広) を用いると特性演算子は $\hat{\mathcal{U}} \;=\; \mathrm{e}^{i\xi\hat{q}/\hbar}\mathrm{e}^{i\eta\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[i\xi\hat{q}/\hbar,\,i\eta\hat{p}/\hbar]} \;=\; \mathrm{e}^{i\xi\hat{q}/\hbar}\mathrm{e}^{i\eta\hat{p}/\hbar}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}i\xi\eta/\hbar}$ と書ける。これを用いると特性関数は以下のように表すことができる:

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(q,p) \;&=\; \int dqdp\langle\psi|q\rangle\langle q|\mathrm{e}^{i\xi\hat{q}/\hbar}|p\rangle\langle p|\mathrm{e}^{i\eta\hat{p}/\hbar}|\psi\rangle\mathrm{e}^{i\xi\eta/(2\hbar)}\\ &=\; \int dqdp\langle\psi|q\rangle\langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle\mathrm{e}^{i\eta\xi/(2\hbar)}\mathrm{e}^{i(\xi q+\eta p)/\hbar}\\ &=\; \int dqdp\langle\psi|q\rangle\langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}}\mathrm{e}^{i(\xi q+\eta p)/\hbar}\\ &=\; \int dqdp\,\mathrm{e}^{i(\xi q+\eta p)/\hbar}\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}}\langle\psi|q\rangle\langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle.\end{aligned} \tag{2.22}$$

最後の等式で部分積分を行った。これを (2.8) に代入して積分を実行するとデルタ関数が出るので、Wigner 関数は

$$\rho_W(q,p,t) = (2\pi\hbar)^2\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}}\langle\psi|q\rangle\langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle \tag{2.23}$$

という便利な形に書ける。実際、(2.23) を (2.17) に代入して、部分積分すると、

$$\langle\hat{A}(\hat{q},\hat{p})\rangle = \int dqdp\langle\psi|q\rangle\langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle\left\{\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}}A_W(q,\,p)\right\} \tag{2.24}$$

を得る。

さて、$A_W(q,\,p)$ は古典的な量 (c 数という) なので、$q,\,p$ の順序は自由に入れ替えることができる。そこで、$A_W(q,\,p)$ のうち p がいつも q の右側になるように書き変えたものを $A_0(q,p)$ と書くことにする: $A_W(q,\,p) = A_0(q,\,p) = \sum_{m,n} a_{mn}q^m p^n$. このとき、ある係数 b_{mn} が存在して、$\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}}A_0(q,\,p) =$

$\sum_{m,n} b_{mn}q^m p^n$ と書ける。すると、

$$\begin{aligned}
\langle\psi|\hat{A}(\hat{q},\hat{p})|\psi\rangle &= \int dqdp\langle\psi|q\rangle\langle q|p\rangle\langle p|\psi\rangle\left\{\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}}A_0(q,\,p)\right\} \\
&= \int dqdp\langle\psi|q\rangle\langle q|p\rangle\left(\sum_{m,n} b_{mn}q^m p^n\right)\langle p|\psi\rangle \\
&= \int dqdp\left(\sum_{m,n} b_{mn}\langle\psi|q\rangle q^m\langle q|p\rangle\langle p|\hat{p}^n|\psi\rangle\right) \\
&= \int dq\left(\sum_{m,n} b_{mn}\langle\psi|q\rangle\langle q|\hat{q}^m\hat{p}^n|\psi\rangle\right) \\
&= \sum_{m,n} b_{mn}\langle\psi|\hat{q}^m\hat{p}^n|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_{m,n} b_{mn}\hat{q}^m\hat{p}^n|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}}A_0(q,\,p)\Big|_{q=\hat{q},p=\hat{p}}|\psi\rangle.
\end{aligned} \tag{2.25}$$

$|\psi\rangle$ は任意であるから次の演算子関係式を得る:

$$\hat{A}(\hat{q},\hat{p}) = \mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}}A_0(q,\,p)\Big|_{q=\hat{q},p=\hat{p}}. \tag{2.26}$$

n 自由度の場合には、$\boldsymbol{q} = (q_1,\,_2,\ldots,\,q_n)$，$\boldsymbol{p} = (p_1,\,p_2,\,\ldots,\,p_n)$ と書くと、

$$\hat{A}(\hat{\boldsymbol{q}},\hat{\boldsymbol{p}}) = \mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}}}A_0(\boldsymbol{q},\,\boldsymbol{p})\Big|_{\boldsymbol{q}=\hat{\boldsymbol{q}},\boldsymbol{p}=\hat{\boldsymbol{p}}} \tag{2.27}$$

となる。ただし、$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}} = \sum_{i=1}^n \frac{\partial}{\partial p_i}\frac{\partial}{\partial q_i}$ である。

これは古典的物理量 $A_0(q,p)$ から対応する量子演算子を構成する一つの処方箋を与える。これを Weyl 処方と呼ぶ [4]。なお後述するように、(2.27) の関係式は曲線座標の場合も成立する。

[例]　たとえば、$A_0(q,p) = qp$ のとき、$\hat{A}(\hat{q},\hat{p}) = \hat{q}\hat{p} - \frac{1}{2}i\hbar = \frac{1}{2}(\hat{q}\hat{p}+\hat{p}\hat{q})$ となる。

3　Weyl 対応：曲がった配位空間の場合

この節では、曲線座標を取る場合、あるいは、曲がった時空を取る場合の位相空間表示および Weyl 対応について解説する。

3.1　曲がった配位空間の上の量子力学

n 次元空間 $(x = (x^1,\,x^2,\,\ldots\,x^n))$ を考えそのメトリックを $g_{ij}(x)$ とする:$dx^2 = \sum_{i,j=1}^n g_{ij}(x)dx^i dx^j$. 通常のように $\det g_{ij}(x) = g(x)$ と書く。ここでは簡単のために、x^i は無限領域に値を持つとする。以下では以下のように略記する：

$$\begin{aligned}
\int dx\,f(x) &= \int dx^1 dx^2\cdots dx^n\,f(x^1,\,x^2,\,\ldots\,x^n), \\
\delta(x-x') &= \delta(x^1-x'^1)\delta(x^2-x'^2)\cdots\delta(x^n-x'^n).
\end{aligned}$$

[4] 例えば、L. E. Reichl, ‘The Transition to Chaos — In Conservative Classical Systems: Quantum Manifestations’ (Springer-Verlag, 1992), Appendix D，参照。

位置演算子 $\hat{x}^i$ $(i = 1, 2, \ldots n)$ の固有ベクトル $|x^i\rangle$ のテンソル積を

$$|x^1\rangle \otimes |x^2\rangle \otimes \cdots \otimes |x^n\rangle = |x^1, x^2, \ldots x^n\rangle \equiv |x\rangle$$

と書く。このとき、$\hat{x}^i|x\rangle = x^i|x\rangle$. その完全性と直交性関係は以下のように表される:

$$\mathbf{1} = \int dx\, \sqrt{g(x)}|x\rangle\langle x|, \quad \langle x|x'\rangle = \frac{1}{\sqrt{g(x)}}\delta(x - x'). \tag{3.28}$$

運動量演算子 $\hat{p}_i$ は次の正準交換関係を満たす:$[\hat{x}^i, \hat{p}_j] = i\hbar\delta^i_j$, $[\hat{p}^i, \hat{p}_j] = 0$. その座標表示は

$$\hat{p}_i = g^{-1/4}(x)\left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial x^i}\right)g^{1/4}(x) = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial x^i} + \frac{1}{2}\Gamma^j_{ji}\right). \tag{3.29}$$

ただし、

$$\Gamma^k_{ji} = \frac{1}{2}g^{kl}\left(\frac{\partial g_{jl}}{\partial x^i} + \frac{\partial g_{il}}{\partial x^j} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^l}\right). \tag{3.30}$$

このとき、$\Gamma^j_{ji} = \frac{1}{2}\frac{1}{g}\frac{\partial g}{\partial x^i} = \frac{1}{2}\frac{\partial \ln g(x)}{\partial x^i}$.

運動量の固有関数 $\langle x|p\rangle = \varphi_p(x)$ は $\hat{p}_i\varphi_p(x) = p_i\varphi(x)$ を満たす。(3.29) を代入してこの微分方程式を解くと、次の規格化された固有関数が得られる：

$$\varphi_p(x) = \frac{\mathrm{e}^{ip\cdot x/\hbar}}{\sqrt{(2\pi\hbar)^n\sqrt{g(x)}}}, \quad \int dx\, \sqrt{g(x)}\varphi^*_{p'}(x)\varphi_p(x) = \delta(p - p'). \tag{3.31}$$

このとき、運動量の固有状態 $|p\rangle$ の完全性は次のように書ける：

$$\mathbf{1} = \int dp\, |p\rangle\langle p|. \tag{3.32}$$

3.2 コヒーレント状態

生成および消滅演算子を通常のように定義する：$\hat{a}^\dagger_i \equiv (\hat{x}_i - i\hat{p}_i)/\sqrt{2\hbar}$ $\hat{a}_i \equiv (\hat{x}_i + i\hat{p}_i)/\sqrt{2\hbar}$. 逆に、$\hat{x}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2}}(\hat{a}_i + \hat{a}^\dagger_i)$, $\hat{p}_i = i\sqrt{\frac{\hbar}{2}}(\hat{a}^\dagger_i - \hat{a}_i)$. このとき、$[\hat{a}_i, \hat{a}^\dagger_j] = \delta_{ij}$. 他の交換子はゼロである。

コヒーレント状態 $|\alpha\rangle$ は次のように定義される $(\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n))$：

$$\hat{a}_i|\alpha\rangle = \alpha_i|\alpha\rangle. \tag{3.33}$$

$\alpha_i = (\xi_i + i\eta_i)/\sqrt{2\hbar}$ と書くと、

$$\langle x|\alpha\rangle = \varphi_\alpha(x) = \frac{1}{(\pi\hbar g(x))^{1/4}}\mathrm{e}^{-(x-\xi)^2/2\hbar + i\eta\cdot x/\hbar + i\mu}. \tag{3.34}$$

3.3 Wigner 関数 (密度行列の Weyl 変換)

空間 n 次元の曲がった時空での特性演算子の Fourier 変換は (2.11) に定義されているデルタ演算子をを用いて次のように書ける：

$$\hat{\Delta}(\hat{x} - x, \hat{p} - p) = \int \frac{d\eta d\xi}{(2\pi\hbar)^n}\,\mathrm{e}^{-i\eta\dot{x} - i\xi\dot{p}}\hat{\mathcal{U}}(\hat{x}, \hat{p}; \xi, \eta). \tag{3.35}$$

曲がった配位空間においては、次の公式が成り立つことに注意する：

$$\mathrm{e}^{-ix\cdot\hat{p}/\hbar}|x'\rangle = \sqrt[4]{\frac{g(x+x')}{g(x')}}|x'+x\rangle, \quad \mathrm{e}^{ip\cdot\hat{x}/\hbar}|p'\rangle = |p'+p\rangle. \tag{3.36}$$

これらは、$|x\rangle$ および $|p\rangle$ の完全性を用い、(3.31) を代入することで容易に導くことができる。(3.36) を用いるとデルタ演算子について次の便利な表式が得られる：

$$\hat{\Delta}(\hat{x}-x,\,\hat{p}-p) \;=\; \int dx' \sqrt[4]{g(x+\frac{x'}{2})g(x-\frac{x'}{2})}\,\mathrm{e}^{ip\cdot x'}|x+\frac{x'}{2}\rangle\langle x-\frac{x'}{2}|. \tag{3.37}$$

これを用いると次の完全性条件が得られる：

$$\mathrm{tr}\left[\hat{\Delta}(\hat{x}-x,\,\hat{p}-p)\hat{\Delta}(\hat{x}-x',\,\hat{p}-p')\right] \;=\; (2\pi\hbar)^n\delta(x-x')\delta(p-p'). \tag{3.38}$$

運動量の固有状態を用いると、直交座標の場合と同じ表式で Wigner 関数 (密度行列の Weyl 変換) は定義される：

$$\rho_W(x,\,p) \;=\; \int dp'\,\mathrm{e}^{ip'\cdot x/\hbar}\langle p-\frac{p'}{2}|\hat{\rho}|p+\frac{p'}{2}\rangle, \tag{3.39}$$

$$\;=\; \mathrm{tr}[\hat{\rho}\hat{\Delta}(\hat{x}-x,\,\hat{p}-p)]. \tag{3.40}$$

ここで (3.37) を用いると曲がった配位空間での Wigner 関数について次の表式を得る：

$$\begin{aligned}\rho_W(x,\,p) \;=\; & \int dx' \sqrt[4]{g(x+\frac{x'}{2})g(x-\frac{x'}{2})} \\ & \times e^{ip'\cdot x/\hbar}|x+\frac{x'}{2}\rangle\langle x-\frac{x'}{2}|.\end{aligned} \tag{3.41}$$

曲がった配位空間の Wigner 関数も準分布関数として次のような性質を持つ：

$$\begin{aligned}&\int\int \frac{dxdp}{(2\pi\hbar)^n}\,\rho_W(x,\,p) = 1, \quad \int \frac{dp}{(2\pi\hbar)^n}\,\rho_W(x,\,p) = \sqrt{g(x)}\,\langle x|\hat{\rho}|x\rangle, \\ &\int \frac{dx}{(2\pi\hbar)^n}\,\rho_W(x,\,p) = \langle p|\hat{\rho}|p\rangle.\end{aligned} \tag{3.42}$$

3.4 曲がった配位空間での任意の演算子の位相空間表示：Weyl 変換

曲がった配位空間での特性関数 (2.4) は直角座標のときの形 (2.22) から少し変更される。これをを示そう。

$$\begin{aligned}\mathcal{U}(x,p) \;=\; & \int dxdp\,\sqrt{g(x)}\langle\psi|x\rangle\langle x|\mathrm{e}^{i\xi\hat{x}/\hbar}|p\rangle\langle p|\mathrm{e}^{i\eta\hat{p}/\hbar}|\psi\rangle\mathrm{e}^{i\xi\eta/(2\hbar)} \\ =\; & \int dxdp\,\sqrt{g(x)}\langle\psi|x\rangle\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle\mathrm{e}^{i\eta\xi/(2\hbar)}\mathrm{e}^{i(\xi x+\eta p)/\hbar} \\ =\; & \int dxdp\,\sqrt{g(x)}\langle\psi|x\rangle\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial x}}\mathrm{e}^{i(\xi x+\eta p)/\hbar} \\ =\; & \int dxdp\,\mathrm{e}^{i(\xi x+\eta p)/\hbar}\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial x}}\,\sqrt{g(x)}\langle\psi|x\rangle\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle.\end{aligned} \tag{3.43}$$

これより、

$$\rho_W(p,x) = \mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial x}}\ \sqrt{g(x)}\langle\psi|x\rangle\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle \tag{3.44}$$

となる。

任意の演算子 $\hat{A}$ の Weyl 変換 (位相空間表示) は次のように書ける：

$$\begin{aligned} A_W(x,\,p) &= \mathrm{tr}[\hat{A}\hat{\Delta}(\hat{x}-x,\,\hat{p}-p)] \\ &= \int dx'\,\sqrt[4]{g(x+\frac{x'}{2})g(x-\frac{x'}{2})} \\ &\qquad \times e^{ip'\cdot x'/\hbar}\langle x-\frac{x'}{2}|\hat{A}|x+\frac{x'}{2}\rangle. \end{aligned} \tag{3.45}$$

逆変換は

$$\hat{A} = \int\int \frac{dxdp}{(2\pi\hbar)^n}A_W(x,\,p)\hat{\Delta}(\hat{x}-x,\,\hat{p}-p). \tag{3.46}$$

任意の 2 つの演算子 $\hat{A}$ と $\hat{B}$ の積のトレースはそれぞれの Weyl 変換の積 $A_W(x,\,p)$ および $B_W(x,\,p)$ を用いて次のように書ける：

$$\mathrm{tr}[\hat{A}\hat{B}] = \int\int dxdp\,A_W(x,\,p)B_W(x,p). \tag{3.47}$$

特に、$\hat{A}$ の期待値は Wigner 関数を用いて

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \mathrm{tr}[\hat{\rho}\hat{A}] = \int\int dxdp\,\rho_W(x,\,p)A_W(x,p) \tag{3.48}$$

ここで (3.44) を用いて部分積分を行うと、

$$\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle = \int dxdp\,\sqrt{g(x)}\langle\psi|x\rangle\langle x|p\rangle\langle p|\psi\rangle\left\{\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial x}}A_0(x,\,p)\right\}$$

さて、直角座標の場合と同様に、$A_W(x,\,p)$ は c 数であることを利用して $A_W(x,\,p)$ のうち p がいつも x の右側になるように書き変えたものを $A_0(x,p)$ と書くことにする: $A_W(x,\,p) = A_0(x,\,p) = \sum_{m,n} a_{mn}x^m p^n$. このとき、ある係数 b_{mn} が存在して、$\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial x}}A_0(x,\,p) = \sum_{m,n} b_{mn}x^m p^n$ と書ける。よって、

$$\begin{aligned} \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle &= \int dxdp\,\sqrt{g(x)}\langle\psi|x\rangle\langle x|p\rangle\left(\sum_{m,n} b_{mn}x^m p^n\right)\langle p|\psi\rangle \\ &= \int dxdp\,\sqrt{g(x)}\left(\sum_{m,n} b_{mn}\langle\psi|x\rangle x^m\langle x|p\rangle\langle p|\hat{p}^n|\psi\rangle\right) \\ &= \int dx\,\sqrt{g(x)}\left(\sum_{m,n} b_{mn}\langle\psi|x\rangle\langle x|\hat{x}^m\hat{p}^n|\psi\rangle\right) \\ &= \sum_{m,n} b_{mn}\langle\psi|\hat{x}^m\hat{p}^n|\psi\rangle = \langle\psi|\sum_{m,n} b_{mn}\hat{x}^m\hat{p}^n|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial x}}A_0(x,\,p)\Big|_{x=\hat{x},p=\hat{p}}|\psi\rangle. \end{aligned} \tag{3.49}$$

$|\psi\rangle$ は任意であるから (2.26) と形式的に同じ演算子関係式を得る:

$$\hat{A}(\hat{x},\hat{p}) = \mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial x}} A_0(x,\, p)\Big|_{x=\hat{x},p=\hat{p}}. \tag{3.50}$$

したがって、n 自由度の場合も直角座標のとき (2.27) と形式的に同じ表式

$$\hat{A}(\hat{\boldsymbol{x}},\hat{\boldsymbol{p}}) = \mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{p}}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}} A_0(\boldsymbol{x},\, \boldsymbol{p})\Big|_{\boldsymbol{x}=\hat{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{p}=\hat{\boldsymbol{p}}} \tag{3.51}$$

となる。

次に、トレースを取らない演算子の積 $\hat{A}\hat{B}$ の位相空間表示を考える。(3.45) をこの積に適用して少し計算すると次の Moyal 積を得る：

$$\begin{aligned}(AB)_W(x,p) &\equiv (A_W \star B_W)(x,\, p) \\ &= \int\!\!\int \frac{dx_1dp_1}{(2\pi\hbar)^n}\int\!\!\int \frac{dx_2dp_2}{(2\pi\hbar)^n}\mathrm{e}^{i(x_1\cdot p_2 - x_2\cdot p_1)/\hbar} \\ &\quad \times A_W(x+x_1/2,\, p+p_1)B_W(x+x_2/2,\, p+p_2).\end{aligned} \tag{3.52}$$

これは直交座標のときと形式的に同じである。したがって、

$$(A_W \star B_W)(x,\, p) = A_W(x+\frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial}_p,\, p-\frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial}_x)B_W(x,\, p), \tag{3.53}$$

$$= A_W(x,p)B_W(x-\frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_p,\, p+\frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_x). \tag{3.54}$$

例　以下にいくつかの基本的な演算子の Weyl 表示を紹介する。

- $\hat{F}(\hat{x})_W = F(x)$.
- $\hat{G}(\hat{p})_W = G(p)$.

逆変換を考える。重要な例は $K = \frac{1}{2m}p_i g^{ij}(x)p_j$ に対応する量子演算子 $\hat{K}(\hat{x},\hat{p})$ である。公式 (3.51) を用いると、

$$\begin{aligned}\hat{K}(\hat{x},\hat{p}) &= \mathrm{e}^{\frac{\hbar}{2i}\frac{\partial}{\partial p_i}\frac{\partial}{\partial x^i}}\ \frac{1}{2m}g^{ij}(x)p_ip_j\Big|_{p_i=\hat{p}_i,x^i=\hat{x}^i} \\ &= \frac{1}{2m}\left[\hat{p}_i\hat{p}_jg^{ij}(\hat{x}) + \frac{\hbar}{i}\hat{p}_i\frac{\partial g^{il}}{\partial x^l} + (\frac{\hbar}{2i})^2\frac{\partial^2 g^{ij}}{\partial x^i\partial x^j}\right] \\ &= \frac{1}{2m}\hat{p}_ig^{ij}(\hat{x})\hat{p}_j \,-\, \frac{\hbar^2}{8m}\frac{\partial^2 g^{ij}}{\partial x^i\partial x^j}.\end{aligned} \tag{3.55}$$

これは逆に、古典 Hamiltonian

$$K_{\mathrm{cor}} = \frac{1}{2m}p_ig^{ij}(x)p_j \,+\, \frac{\hbar^2}{8m}\frac{\partial^2 g^{ij}}{\partial x^i\partial x^j} \tag{3.56}$$

に対応する量子演算子が

$$\hat{K}_{\mathrm{cor}} = \frac{1}{2m}\hat{p}_ig^{ij}(\hat{x})\hat{p}_j \tag{3.57}$$

であることを意味する。実は、メトリックが $g^{ij}(x)$ で与えられる系の運動エネルギー演算子 $\hat{K}_g$ は、Riemann 多様体の Laplace-Beltran 演算子 Δ を用いて、

$$
\begin{aligned}
\hat{K}_g &\equiv -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta = \frac{1}{2m}g^{-1/4}(x)\hat{p}_i g^{1/2}(x)g^{ij}(x)\hat{p}_j g^{-1/4}(x) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\sqrt{g(x)}}\frac{\partial}{\partial x^i}\sqrt{g}g^{ij}(x)\frac{\partial}{\partial x^j} \qquad (3.58) \\
&= \frac{1}{2m}\hat{p}_i g^{ij}(\hat{x})\hat{p}_j \,+\, \hbar^2 Q(\hat{x}), \qquad (3.59) \\
Q(x) &= \frac{1}{4m}g^{ij}(x)\left[\frac{\partial}{\partial x^j}\Gamma^k_{ki} \,-\, \Gamma^k_{ij}\Gamma^l_{lk} \,-\, \frac{1}{2}\Gamma^k_{ki}\Gamma^l_{lj}\right] \qquad (3.60)
\end{aligned}
$$

と書ける。ただし、$\Gamma^i_{jk} = \frac{1}{2}g^{il}(g_{jl,k} + g_{kl,j} - g_{jk,l})$ は Christoffel の記号である。下付きのコンマの後の添え字は座標微分を意味する：$g_{jl,k} = \frac{g_{jl}}{\partial x^k}$. 以下でもこの記号を用いる。この Weyl 対応を用いると、$\hat{K}_g$ に対応する古典 Hamiltonian は

$$
K_g = \frac{1}{2m}p_i g^{ij}(x)p_j \,+\, \frac{\hbar^2}{8m}\frac{\partial^2 g^{ij}}{\partial x^i \partial x^j} \,+\, \hbar^2 Q(x) \qquad (3.61)
$$

である。

ここで、メトリックテンソルの 2 階微分を Christoffel の記号を用いて書き直してみよう。まず、次の関係式に注意する：

$$
\nabla_k g^{ij} \equiv \frac{\partial g^{ij}}{\partial x^k} + \Gamma^i_{lk}g^{lj} + \Gamma^j_{lk}g^{il} = 0. \qquad (3.62)
$$

これを繰り返し用いると、

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial^2 g^{ij}}{\partial x^i \partial x^j} &= -\frac{\partial}{\partial x^j}(\Gamma^i_{li}g^{lj} + \Gamma^j_{li}g^{il}) \\
&= -\Gamma^i_{li,j}g^{lj} - \Gamma^j_{li,j}g^{il} - \Gamma^i_{li}g^{lj}_{,j} - \Gamma^j_{li}g^{il}_{,j} \\
&= g^{ij}[-(\Gamma^l_{il,j} + \Gamma^l_{ij,l}) + \Gamma^k_{ij}\Gamma^l_{kl} + \Gamma^k_{ik}\Gamma^l_{jl} + 2\Gamma^l_{ik}\Gamma^k_{jl}] \qquad (3.63)
\end{aligned}
$$

すると、(3.61) の第 2 項以降の和は

$$
\frac{\hbar^2}{8m}\frac{\partial^2 g^{ij}}{\partial x^i \partial x^j} \,+\, \hbar^2 Q(x) = \frac{\hbar^2}{8m}[R(x) + g^{ij}\Gamma^l_{mi}\Gamma^m_{lj}] \qquad (3.64)
$$

と書けることが分かる。ここに、$R(x)$ は次のように定義される Ricci スカラー曲率テンソルである：

$$
R(x) \equiv g^{ij}(\Gamma^l_{lj,i} - \Gamma^l_{ij,l} + \Gamma^l_{mj}\Gamma^m_{il} - \Gamma^l_{ij}\Gamma^m_{ml}). \qquad (3.65)
$$

まとめると、

$$
K_g = \frac{1}{2m}p_i g^{ij}(x)p_j \,+\, \frac{\hbar^2}{8m}[R(x) + g^{ij}\Gamma^l_{mi}\Gamma^m_{lj}]. \qquad (3.66)
$$

これは曲がった配位空間での径路積分で使われるべき古典 Hamiltonian になる [5]。

[5]M.M. Mizrahi,J. Math. Phys. **16**(1975)2201.

4 補遺：微分幾何初歩

n 次元空間を考え，ここでは座標の番号を上付き添え字として付けることにする。Descartes 座標で $\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} x_0^i \boldsymbol{e}_{0i}$、と表される空間上の点 P を考える。ここに，$\boldsymbol{e}_{0i}$ はデカルト座標系での正規直交基底ベクトルである：$(\boldsymbol{e}_{0i}, \boldsymbol{e}_{0j}) = \delta_{ij}$. ここで次のように，曲線座標系 $(x^1, x^2, \ldots, x^n)$ を導入する[6]：$x_0^i = x_0^i(x^1, x^2, \ldots, x^n)$， $(i = 1, 2, \ldots, n)$．この変数変換に伴う Jacobi 行列 $\boldsymbol{J}$ は次のように書ける：$(\boldsymbol{J})^i_j = \partial x_0^i / \partial x^j \equiv J^i_j$．Jacobian は $J = \det(\boldsymbol{J}) = |\boldsymbol{J}|$．したがって，任意の積分可能な関数 $F(\boldsymbol{x}_0)$ の積分は以下のように書ける：

$$\int F(\boldsymbol{x}_0) d\boldsymbol{x}_0 = \int F(\boldsymbol{x}_0(\boldsymbol{x})) J d\boldsymbol{x}.$$

位置ベクトルの微小な変化 $d\boldsymbol{x}$ を考える：$d\boldsymbol{x} = dx_0^i \boldsymbol{e}_{0i} = dx^i \boldsymbol{e}_i$．このとき、

$$\boldsymbol{e}_i = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial x^i} = \frac{\partial x_0^j}{\partial x^i} \boldsymbol{e}_{0j}. \tag{4.67}$$

逆に、$\boldsymbol{e}_{0j} = \frac{\partial x^l}{\partial x_0^i} \boldsymbol{e}_l$.

この曲線座標系の自然な基底ベクトルは $\boldsymbol{e}_i(\boldsymbol{x})$ $(i = 1, 2, \ldots, n)$．これをこの曲線座標系の「自然標構」という．また，位置 $\boldsymbol{x}$ に依存するので「動座標系」とも呼ばれる．以下では，$\boldsymbol{e}_i$ の $\boldsymbol{x}$ 依存性を書かない．$\{\boldsymbol{e}_i\}_{i=1,2,\ldots,n}$ は互いに 1 次独立ではあるが必ずしも直交していないとし，その互いの内積は以下のように与えられているものとする：

$$\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_j) = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial x^i} \cdot \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial x^j} = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial x_0^k}{\partial x^i} \frac{\partial x_0^k}{\partial x^j} \equiv g_{ij} = g_{ji}. \tag{4.68}$$

g_{ij} を (i, j) 成分とする対称行列 $\boldsymbol{g}$ の行列式を g と書く：$g = |\boldsymbol{g}|$．$J = \sqrt{g}$ である．ここで，g が正定値であることを用いた．実際，$g_{ij} = \sum_k J^k_i J^k_j = \left(\boldsymbol{J}\,{}^t\boldsymbol{J}\right)_{ij}$ と書けるので，$g = |\boldsymbol{g}| = |\boldsymbol{J}\,{}^t\boldsymbol{J}| = |\boldsymbol{J}||\,{}^t\boldsymbol{J}| = |\boldsymbol{J}|^2 = J^2 > 0$.

$\boldsymbol{g}$ の逆行列 $\boldsymbol{g}^{-1}$ の (i, j) 成分を g^{ij} と書くことにする：$g^{ik} g_{kj} = \delta^i_j$.

位置の微小変位 $d\boldsymbol{x} = \sum_i (\partial \boldsymbol{x}/\partial x^i) dx^i = \sum_i \boldsymbol{e}_i dx^i$ の大きさの 2 乗は

$$d\boldsymbol{x} \cdot d\boldsymbol{x} = (\sum_i \boldsymbol{e}_i dx^i, \sum_j \boldsymbol{e}_j dx^j) = \sum_{i,j} dx^i dx^j (\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) = \sum_{i,j} g_{ij} dx^i dx^j \tag{4.69}$$

となる。この表式から，g_{ij} は計量テンソルと呼ばれる。

4.1 Christoffel の記号 Γ^k_{ji}

Christoffel の記号 Γ^k_{ji} を次のように定義する：

$$\frac{\partial \boldsymbol{e}_i}{\partial x^j} = \Gamma^k_{ji} \boldsymbol{e}_k. \tag{4.70}$$

(4.67) を用いて左辺の微分を実行して、微分の順序を入れ替えると、

$$\frac{\partial \boldsymbol{e}_i}{\partial x^j} = \frac{\partial^2 \boldsymbol{x}}{\partial x^j \partial x^i} = \frac{\partial \boldsymbol{e}_j}{\partial x^i} = \Gamma^k_{ij} \boldsymbol{e}_k.$$

[6]精確には、各空間の領域ごとに局所的に定義していかなければならない。

よって、Christoffel の記号は下付き添え字について対称である：

$$\Gamma^k_{ji} = \Gamma^k_{ij}. \tag{4.71}$$

次に、計量テンソルの定義式 (4.68) を x^k で微分すると、

$$\begin{aligned} \frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} &= \frac{\partial \boldsymbol{e}_i}{\partial x^k}\cdot \boldsymbol{e}_j + \boldsymbol{e}_i \cdot \frac{\partial \boldsymbol{e}_j}{\partial x^k} = \Gamma^l_{ki}\boldsymbol{e}_l \cdot \boldsymbol{e}_j + \boldsymbol{e}_i \cdot \Gamma^l_{kj}\boldsymbol{e}_l \\ &= \Gamma^l_{ki} g_{lj} + \Gamma^l_{kj} g_{il}. \qquad (i) \end{aligned}$$

これは、Γ^k_{ij} についての方程式とみなすことができる。この独立な方程式の個数は Γ^k_{ij} の独立成分の数は、下付き添え字についての対称性を考慮に入れて、$\frac{n(n-1)}{2} \times n$ に等しい。よって、上式は Γ^k_{ij} を決定するのに必要十分な数の方程式になている!

(**??**) の添え字 $(i,\, j,\, k)$ を巡回的に変えた式を書き下すと、

$$\begin{aligned} g_{jk,\,i} &= \Gamma^l_{ij} g_{lk} + \Gamma^l_{ik} g_{jl}, \qquad (ii) \\ g_{ki,\,j} &= \Gamma^l_{jk} g_{li} + \Gamma^l_{ji} g_{kl}. \qquad (iii) \end{aligned}$$

ただし、$\frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} \equiv g_{ij,\,k}$ と書いた。以下も同様。((i)+(ii)−(iii))/2 を作ると、

$$\frac{1}{2}(g_{ij,\,k} + g_{jk,\,i} - g_{ki,\,j}) = \Gamma^l_{ki} g_{lj}.$$

この両辺に逆行列 g^{nj} を掛けると、

$$\Gamma^n_{ki} = \frac{1}{2} g^{nj}(g_{ij,\,k} + g_{jk,\,i} - g_{ki,\,j}) \tag{4.72}$$

を得る。

ところで、(i) 式の右辺を移項すると、

$$\frac{\partial g_{ij}}{\partial x^k} - \Gamma^l_{ki} g_{lj} - \Gamma^l_{kj} g_{il} = 0. \tag{4.73}$$

この左辺を $(\nabla_k g)_{ij}$ と書き、計量テンソル g_{ij} の共変微分と呼ぶ。すなわち、計量テンソル g_{ij} の共変微分は 0 である:

$$(\nabla_k g)_{ij} = 0. \tag{4.74}$$

4.2 共変・反変ベクトル、テンソル、混合テンソル

次の座標変換を行う：$x^i = x^i(x'_1,\, x'_2, \ldots,\, x'_n)$. このとき、位置ベクトルの微小変化は

$$d\boldsymbol{x} = dx^i \boldsymbol{e}_i(x) = dx'^i \boldsymbol{e}'_i(x'). \tag{4.75}$$

このとき、$\boldsymbol{e}_i$ と $\boldsymbol{e}'_j$ $(i,\, j = 1,\, 2, \ldots,\, n)$ とは正則な線形変換で結びついている：

$$\boldsymbol{e}_i = T^j_i \boldsymbol{e}'_j. \tag{4.76}$$

このとき、

$$dx'^j = dx^i T^j_i, \quad T^i_j = \frac{\partial x'^j}{\partial x_i}. \tag{4.77}$$

この座標変換に対して $\boldsymbol{v}(x) = v^i(x)\boldsymbol{e}_i(x) = v'^j(x')\boldsymbol{e}'_j$ と書けるをベクトルと呼び、v^i をその**反変成分**と呼ぶ。明らかに、

$$v'^j = v^i T^j_i = \frac{\partial x'^j}{\partial x^i} f^i. \tag{4.78}$$

(4.76) の逆変換は、

$$\boldsymbol{e}'_k = (T^{-1})^i_k \boldsymbol{e}_i. \tag{4.79}$$

ところが、$d\boldsymbol{x} = dx^i\boldsymbol{e}_i = dx'^k(T^{-1})^i_k\boldsymbol{e}_i$ と書けるから、$= \frac{\partial x^i}{\partial x'^k}$ である。これは、$\frac{\partial x^i}{\partial x'^j}\frac{\partial x'^j}{\partial x^k} = \delta^i_k$ という関係式と同値である。

共変成分　$\boldsymbol{e}_i\,(i = 1, 2, \ldots, n)$ との内積が単位行列の成分となるベクトル群 $\boldsymbol{e}_j\,(j = 1, 2, \ldots, n)$ を考える:

$$\boldsymbol{e}^j \cdot \boldsymbol{e}_i = \delta^j_i. \tag{4.80}$$

たとえば、3 次元ベクトルの場合、$N \equiv \boldsymbol{e}_1 \cdot (\boldsymbol{e}_2 \times \boldsymbol{e}_3)$ を用いて、

$$\boldsymbol{e}^1 = \frac{\boldsymbol{e}_2 \times \boldsymbol{e}_3}{N}, \quad \boldsymbol{e}^2 = \frac{\boldsymbol{e}_3 \times \boldsymbol{e}_1}{N}, \quad \boldsymbol{e}^3 = \frac{\boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{e}_2}{N}$$

と与えられる。

このとき、$dx^j = \boldsymbol{e}^j \cdot d\boldsymbol{x}$. $\boldsymbol{e}^i$ を用いて、dx_i を次のように定義する：

$$d\boldsymbol{x} = dx_i\boldsymbol{e}^i. \tag{4.81}$$

これを共変成分と呼ぶ。

共変成分の座標変換に対する変換則を導く。$d\boldsymbol{x} = dx_i\boldsymbol{e}^i = dx'_j\boldsymbol{e}'^j$ より、$dx'^j = \boldsymbol{e}'^j \cdot d\boldsymbol{x} = T^j_i dx^i = T^j_i(\boldsymbol{e}^i \cdot d\boldsymbol{x})$ より、$\boldsymbol{e}'^j = T^j_i\boldsymbol{e}^i$. よって、$d\boldsymbol{x} = dx_i\boldsymbol{e}^i = dx'_j\boldsymbol{e}'^j = dx'_jT^j_i\boldsymbol{e}^i$ より、

$$dx_i = T^j_i dx'_j, \quad T^j_i = \frac{\partial x_i}{\partial x'_j}. \tag{4.82}$$

逆に、

$$\boldsymbol{e}^i = (T^{-1})^j_i\boldsymbol{e}'^j = \frac{\partial x^i}{\partial x'^j}\boldsymbol{e}'^j. \tag{4.83}$$

一般のベクトル $\boldsymbol{v}$ に対して成分 v_i を $\boldsymbol{e}^i$ を用いて次のように定義する：$\boldsymbol{v} = f_i\boldsymbol{e}^i$. このとき、$v_i$ を $\boldsymbol{v}$ の共変成分と呼ぶ。その変換性は、$\boldsymbol{v} = v_i\boldsymbol{e}^i = v'_j\boldsymbol{e}'^j$ より、

$$v_i = T^j_i v'_j, \quad v'_i = (T^{-1})^j_i v_j = \frac{\partial x^j}{\partial x'^i} v_j \tag{4.84}$$

となる。

反変ベクトル $\boldsymbol{e}^i$ の微分

$\frac{\partial \boldsymbol{e}^i}{\partial x^j} = \Lambda^i_{jk}\boldsymbol{e}^k$ と書く。$\boldsymbol{e}^i \cdot \boldsymbol{e}_k = \delta^i_k$ を x^j で微分すると、$0 = \frac{\partial \boldsymbol{e}^i}{\partial x^j} \cdot \boldsymbol{e}_k + \boldsymbol{e}^i \cdot \frac{\partial \boldsymbol{e}_k}{\partial x^j} = \Lambda^i_{jl}\boldsymbol{e}^l \cdot \boldsymbol{e}_k + \boldsymbol{e}^i \cdot \Gamma^l_{jk}\boldsymbol{e}_l = \Lambda^i_{jl}\delta^l_k + \Gamma^l_{jk}\delta^i_l = \Lambda^i_{jk} + \Gamma^i_{jk}$. ゆえに、

$$\Lambda^i_{jk} = -\Gamma^i_{jk}. \tag{4.85}$$

ベクトル $\boldsymbol{v}$ の x^j-微分の反変成分

ベクトル $\boldsymbol{v} = v^i\boldsymbol{e}_i$ を x^j で微分すると、$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial x^j} = \frac{\partial v^i}{\partial x^j}\boldsymbol{e}_i + v^i\frac{\partial \boldsymbol{e}_i}{\partial x^j} = \frac{\partial v^i}{\partial x^j}\boldsymbol{e}_i + v^i\Gamma^k_{ji}\boldsymbol{e}_k = [\frac{\partial v^k}{\partial x^j} + v^i\Gamma^k_{ji}]\boldsymbol{e}_k$.
よって、ベクトル $\boldsymbol{v}$ の x^j-微分の反変 k-成分は

$$\frac{\partial v^k}{\partial x^j} + \Gamma^k_{ji}v^i \equiv (\nabla_j \boldsymbol{v})^k \tag{4.86}$$

と書ける。

ベクトル $\boldsymbol{v}$ の x^j-微分の共変成分

ベクトル $\boldsymbol{v} = v_i\boldsymbol{e}^i$ を x^j で微分すると、$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial x^j} = \frac{\partial v_i}{\partial x^j}\boldsymbol{e}^i + v_i\frac{\partial \boldsymbol{e}^i}{\partial x^j} = \frac{\partial v_i}{\partial x^j}\boldsymbol{e}^i + v_i\Lambda^i_{jk}\boldsymbol{e}^k = [\frac{\partial v_k}{\partial x^j} - v_i\Gamma^i_{jk}]\boldsymbol{e}^k$.
よって、ベクトル $\boldsymbol{v}$ の x^j-微分の共変 k-成分は

$$\frac{\partial v_k}{\partial x^j} - \Gamma^i_{jk}v_i \equiv (\nabla_j \boldsymbol{v})_k \tag{4.87}$$

と書ける。

2 階テンソル場の微分の変換性

共変および反変ベクトル $\boldsymbol{e}_i$，$\boldsymbol{e}^j$ を用いて次のように表されるテンソル場を考える：$\mathbf{T} = T^i_j\boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}^j$.
このとき、座標変換に対して i，j の添え字についてそれぞれ反変および共変ベクトル成分と同様の変換性を持つ。そのため、これを **2 階の混合テンソル**と呼ぶ。x^k で微分すると、$\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial x^k} = \frac{\partial T^i_j}{\partial x^k}\boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}^j + T^i_j\frac{\partial \boldsymbol{e}_i}{\partial x^k} \otimes \boldsymbol{e}^j + T^i_j\boldsymbol{e}_i \otimes \frac{\partial \boldsymbol{e}^j}{\partial x^k} = \frac{\partial T^i_j}{\partial x^k}\boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{e}^j + T^i_j\Gamma^l_{ki}\boldsymbol{e}_l \otimes \boldsymbol{e}^j - T^i_j\boldsymbol{e}_i \otimes \Gamma^j_{kl}\boldsymbol{e}^l = [\frac{\partial T^h_l}{\partial x^k} + T^i_l\Gamma^h_{ki} - T^h_j\Gamma^j_{kl}]\boldsymbol{e}_h \otimes \boldsymbol{e}^l$.
ゆえに、この混合テンソルの x^k 微分の成分表示は

$$\frac{\partial T^h_l}{\partial x^k} + \Gamma^h_{ki}T^i_l - \Gamma^j_{kl}T^h_j \equiv (\nabla_k \mathbf{T})^h_l \tag{4.88}$$

と書ける。

同様にして、以下のように書けることは定義も含めて明らかであろう：

$$(\nabla_k \mathbf{T})_{hl} = \frac{\partial T_{hl}}{\partial x^k} - \Gamma^j_{kh}T_{jl} - \Gamma^j_{kl}T_{hj} \tag{4.89}$$

$$(\nabla_k \mathbf{T})^{hl} = \frac{\partial T^{hl}}{\partial x^k} + \Gamma^h_{kj}T^{jl} + \Gamma^l_{kj}T^{hj}. \tag{4.90}$$

計量テンソル g_{ij}，g^{ij} および δ^i_j の共変微分に対する定数性

$g_{ij} = \boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}_j$ は 2 階の共変テンソル成分である [7]．したがって、(4.89) より、この x^k 微分は $(\nabla_k \mathrm{g})_{hl} = \frac{\partial g_{hl}}{\partial x^k} - \Gamma^j_{kh}g_{jl} - \Gamma^j_{kl}g_{hj}$．ところが、左辺は (4.73) より 0 である。

混合テンソル $\delta^i_j = \boldsymbol{e}^i \cdot \boldsymbol{e}_j$ の共変微分は (4.88) より、$\frac{\partial \delta^h_l}{\partial x^k} + \Gamma^h_{ki}\delta^i_l - \Gamma^j_{kl}\delta^h_j = \Gamma^h_{kl} - \Gamma^h_{kl} = 0$.

次に、2 階反変テンソル g^{ij} の共変微分を考える。$g_{jl}g^{il} = \delta^i_j$ の x^k についての共変微分は、$(\nabla_k g)_{jl}g^i l + g_{jl}(\nabla_k g)^{il} = (\nabla_k \delta)^i_j = 0$．ところが、$(\nabla_k g)_{jl} = 0$ であるから、$g_{jl}(\nabla_k g)^{il} = 0$．左から逆行列 g^{hj} を掛けて、$(\nabla_k g)^{il} = 0$ を得る．

以上より、計量テンソル g_{ij}，g^{ij} および δ^i_j の共変微分に対する定数性が言えた。

[7] $\boldsymbol{g} = g_{ij}\boldsymbol{e}^i \otimes \boldsymbol{e}^j$.