

古典場

ここでは、場に対する解析力学の話を見ていきます

連成振動の連続極限の一般化として場に対するオイラー・ラグランジュ方程式を作ります。後半では汎関数を使った話をしています。

「 \cdot 」は t の偏微分です。

場の量子論は簡単に言えば、量子論での多体系 (多粒子系) の記述に適した理論です。このため、量子力学の拡張として、物性のような多数の非相対論的な電子を扱う分野で使われます。そして、相対論的な領域では素粒子に対して使われます。また、ここでの相対論は特殊相対性理論のことです。

場の量子論は名前の通り場 (field) による理論で、空間座標 x と時間 t に依存する関数 $\phi(x, t)$ が場と呼ばれます。場を使った理論は場の理論と呼ばれ、電磁気は古典的な場の理論です。他にも力学での重力も重力ポテンシャルを考えることで古典的な場の理論となります。

量子力学では古典力学との対応から量子化の手続きが与えられているように、場の量子論でも古典的な場の理論 (量子論でない場の理論) との対応から量子化の手続きが与えられています。なので、ここでは古典的な場の話をしていきます。

これから、例として連成振動の連続極限が場になることを示します。1 個のバネの運動方程式は、質量を m 、振動していないときの位置からのズレを $u(t)$ とすれば

$$m \frac{d^2 u}{dt^2} = -\gamma u \quad (\gamma > 0)$$

ポテンシャル U は

$$U = \frac{1}{2} \gamma u^2$$

これを、力学での「連成振動」と同じように N 個のバネが繋がっているとします。このときの運動方程式は、バネにつける重りの質量は全て m 、各バネの釣り合っているときの位置からのズレを u_i とすれば

$$m \frac{d^2 u_i}{dt^2} = -2\gamma u_i + \gamma u_{i+1} + \gamma u_{i-1}$$

$i = 1, 2, \dots, N$, $u_0 = 0$ とします。全体のポテンシャル U は 2 つのバネの間のポテンシャルを全て足せばいいので、2 つのバネの間の変位の差 $u_{i+1} - u_i$ から

$$U = \frac{1}{2} \gamma \sum_{i=1}^{N-1} (u_{i+1} - u_i)^2$$

なので、力学的エネルギー E は

$$E = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \dot{u}_i^2 + \frac{1}{2} \gamma \sum_{i=1}^{N-1} (u_{i+1} - u_i)^2 \quad (1)$$

よって、ラグランジアン L は

$$L = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \dot{u}_i^2 - \frac{1}{2} \gamma \sum_{i=1}^{N-1} (u_{i+1} - u_i)^2$$

実際にオイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{u}_i} - \frac{\partial L}{\partial u_i} = 0$$

に入れば

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{u}_i} = m \frac{d^2 u_i}{dt^2}$$

第二項は

$$\begin{aligned} \frac{\partial L}{\partial u_i} &= \frac{\partial}{\partial u_i} \left(\frac{1}{2} \gamma (u_2 - u_1)^2 + \dots + \frac{1}{2} \gamma (u_i - u_{i-1})^2 + \frac{1}{2} \gamma (u_{i+1} - u_i)^2 + \dots \right) \\ &= \gamma (u_i - u_{i-1}) - \gamma (u_{i+1} - u_i) \\ &= 2\gamma u_i - \gamma u_{i-1} - \gamma u_{i+1} \end{aligned}$$

となって、一致します。

$u_i(t)$ の添え字 i はバネの番号ですが、これを位置 x_i で区別し、 $u(x_i, t)$ とします。長さ l にわたって N 個のバネが繋がっていると、 $\epsilon = l/N$ とすれば、 $x_{i+1} = x_i + \epsilon$ 、 n 番目の位置は $x_n = n\epsilon$ となります。

$\epsilon \rightarrow 0$ の極限で、位置 x_i は連続的な x となり、運動方程式は波動方程式

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial t^2} = v^2 \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} \quad (v^2 = \frac{\gamma \epsilon}{m})$$

となります。離散的に区別されていた変位 $u_i(t)$ が関数 $u(x, t)$ 、つまり場 $u(x, t)$ になります。このように、波動方程式は場に対する方程式です。

同様に、ラグランジアンを ϵ で書き換えます。バネ全体の質量を M とすれば $m = M/N$ なので

$$\begin{aligned} L &= \left(\frac{1}{2} \frac{M}{\epsilon N} \sum_{i=1}^N \dot{u}^2(x_i, t) - \frac{1}{2} \gamma \sum_{i=1}^{N-1} \frac{(u(x_{i+1}, t) - u(x_i, t))^2}{\epsilon} \right) \epsilon \\ &= \frac{1}{2} \rho \sum_{i=1}^N \dot{u}^2(x_i, t) \epsilon - \frac{1}{2} \gamma \sum_{i=1}^{N-1} \frac{(u(x_{i+1}, t) - u(x_i, t))^2}{\epsilon} \epsilon \end{aligned}$$

$\epsilon N = l$ なので $\rho = M/l$ は定数密度です。 $\epsilon \rightarrow 0$ で第一項は x 積分、第二項は x 微分と x 積分が出てきて

$$L = \int_0^l dx \left(\frac{1}{2} \rho \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} \right)^2 - \frac{1}{2} \gamma \left(\frac{\partial u(x, t)}{\partial x} \right)^2 \right) = \int_0^l dx \mathcal{L} \left(u, \frac{\partial u}{\partial t}, \frac{\partial u}{\partial x} \right) \quad (2)$$

\mathcal{L} をラグランジアン密度と呼びます。このように、連続極限にすると、空間積分が現れます。言い換えれば、各点の和が連続極限によって積分になったと言えます。

場に対しても最小作用の原理を使ったとき、今の場合で言えば波動方程式が出てくるのかを、この結果を踏まえて見ていきます。

N 個の点粒子の場合、位置が $q_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, N$)、速度が \dot{q}_i (ドットは時間微分) で与えられていて、お互いに相互作用していないなら、全ラグランジアン L は

$$L = \sum_{i=1}^N L(q_i, \frac{dq_i}{dt}) \quad (3)$$

と書けます (時間に陽に依存しないとしています)。これをオイラー・ラグランジュ方程式に入れることで運動方程式となります。このとき、粒子は離散的で有限の個数とするので、有限の自由度と言われます。

連続極限によって、連成振動で見たように、点粒子の位置位置 q_i は連続的な変数 x になります。この x は粒子の位置 q_i とは違う意味を持ちます。 q_i は粒子の位置 (軌道) ですが、 x は空間の位置でしかありません。関数の変数として言えば、 x は x 地点での場 ϕ の値を与える変数ということです。つまり、 x は空間上のただの目印で (粒子の位置を区別する添え字 i に対応)、場 $\phi(x, t)$ は連続的な目印によって値が変わる連続的な関数です。このことを踏まえれば、 $\phi(x, t)$ は q_i に対応していると言えます (q_i は i によって指定される粒子の位置、 $\phi(x, t)$ は x によって指定される場の値という対応関係から)。

点粒子に対するラグランジアンは $q(t), dq(t)/dt$ を変数に持つとし、作用 S と変分 δS は

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q, \frac{dq}{dt}), \quad \delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \delta L(q, \frac{dq}{dt})$$

この連続極限は連成振動で見たように、対応する場 $\phi(x, t)$ によるラグランジアン密度によって

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \mathcal{L}(\phi, \nabla\phi, \frac{\partial\phi}{\partial t}), \quad \delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \delta\mathcal{L}(\phi, \nabla\phi, \frac{\partial\phi}{\partial t})$$

と書けるとします。空間は 3 次元としています。ラグランジアンは

$$L(t) = \int d^3x \mathcal{L}(\phi, \nabla\phi, \frac{\partial\phi}{\partial t})$$

ラグランジアン密度では場が変数になっているので、作用の変分 δS は場 ϕ の変分 $\delta\phi$ によるものとし (x 積分によって L は x に依存していない)。これが、場の量子論で一般的に使われる作用の形です (理由は最後に触れます)。

ラグランジアン密度の変分は $\phi(x, t), \nabla\phi(x, t), \dot{\phi}(x, t)$ によるので

$$\delta\mathcal{L} = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi(\mathbf{x}, t)}\delta\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))}\delta\nabla\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)}\delta\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)$$

「 \cdot 」は t の偏微分とします。第二項は分子の ∇ と変分の $\delta\nabla\phi$ による内積になっています。これによって $L(t)$ の変分は

$$\delta L = \int d^3x (\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\phi(\mathbf{x}, t)}\delta\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))}\delta\nabla\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)}\delta\dot{\phi}(\mathbf{x}, t))$$

となります。これに対して最小作用の原理を使います。

ここで、時間の始点と終点の変分は0という条件 $\delta\phi(\mathbf{x}, t_1) = \delta\phi(\mathbf{x}, t_2) = 0$ を加えます。さらに、 t_1 から t_2 の間の時間において、3次元積分領域の表面 S_3 において $\delta\phi(\mathbf{x}, t)|_{S_3} = \delta\phi(\mathbf{x}, t_2)|_{S_3} = 0$ とします。そうすると、ガウスの発散定理から

$$\int d^3x \nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))} \delta\phi(\mathbf{x}, t) \right) = \int_{S_3} d\mathbf{S} \cdot \mathbf{n} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))} \delta\phi(\mathbf{x}, t) = 0 \quad (4)$$

となります。 \mathbf{n} は面 S の法線ベクトルです。

δL の第二項

$$\nabla \cdot \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))} \delta\phi(\mathbf{x}, t) \right) = \left(\nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))} \right) \delta\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))} \nabla \delta\phi(\mathbf{x}, t)$$

に対して、(4) を使えば

$$\delta L = \int d^3x \left(\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\phi(\mathbf{x}, t)} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))} \right) \delta\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} \delta\dot{\phi}(\mathbf{x}, t) \right) \quad (5)$$

今の変分に対して作用の変分 δS は0になるとして

$$\begin{aligned} \delta S &= \int_{t_1}^{t_2} dt \delta L \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \left(\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\phi(\mathbf{x}, t)} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))} \right) \delta\phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} \delta\dot{\phi}(\mathbf{x}, t) \right) \\ &= \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \left(\left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\phi(\mathbf{x}, t)} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} \right) \delta\phi(\mathbf{x}, t) \right) \\ &= 0 \end{aligned}$$

下から2行目に行くときに、第二項で時間積分の部分積分をして $\delta\phi(\mathbf{x}, t_1) = \delta\phi(\mathbf{x}, t_2) = 0$ を使っています。よって、ラグランジアン密度に対するオイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\phi(\mathbf{x}, t)} - \nabla \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial\dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} = 0$$

が求まります。形自体は点粒子のオイラー・ラグランジュ方程式と同じです。これに、(2) を入れれば

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial u(\mathbf{x}, t)} &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial u/\partial x)} &= -\gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \\ \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial u/\partial t)} &= \rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \end{aligned}$$

なので

$$\rho \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \gamma \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} \quad \left(\frac{\gamma}{\rho} = \frac{\gamma N \epsilon}{M} = \frac{\gamma \epsilon}{m} = v^2 \right)$$

となり、波動方程式になります。

このようにして、場によるラグランジアン形式が作られます。場の概念の便利なところは、通常の N 粒子の記述では N 個の位置 (N 次元配位空間。位相空間の座標のみ版) を必要とするのに対して、 x, t による 4 次元時空によって多体系を表現できる点です (場を使ったラグランジアンには (3) と違い x, t しかない)。ただし、解釈の問題も絡んできますが、量子論において使われる粒子の場は波動関数で、波動関数は粒子の位置の確率なので、確定した位置の連続極限とは異なっています (力学の連続体の定義とは意味合いが異なる)。

相対論的な表記

$$\partial_\mu \phi = \frac{\partial \phi}{\partial x^\mu} = \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}, \nabla \phi \right)$$

を使うと、オイラー・ラグランジュ方程式は

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi(x)} - \frac{\partial}{\partial x^\mu} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi)} = 0$$

と書けます。ここでは自然単位系を使うので、 $c = 1$ から ($x^0 = ct$)、そのまま置き換えています。また、場 ϕ に対する境界の条件は、4 次元積分領域の表面を S_4 とすれば、 $\delta u(x)|_{S_4} = 0$ とまとめて書いて

$$\int d^4x \partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\partial_\mu \phi(x))} \delta \phi(x) \right) = 0$$

となります。

ハミルトン形式も同じように作れます。場 $\phi(x, t)$ の共役な場 $\pi(x, t)$ を

$$\pi(x, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(x, t)}$$

によって定義します。共役な場は π を使うことが多いので、円周率の π との区別に気を付けてください。解析力学との対応で書けば、 q の共役量を p として

$$q \Leftrightarrow \phi$$

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \Leftrightarrow \pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(x, t)}$$

となります。

共役な場によって、ハミルトニアン密度 \mathcal{H} を

$$\mathcal{H} = \pi(x, t) \dot{\phi}(x, t) - \mathcal{L}$$

として、ハミルトニアン H を

$$H = \int d^3x \mathcal{H}$$

と与えます。連成振動の場合では

$$p(x, t) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{u}(x, t)} = \rho \dot{u}(x, t)$$

なので

$$\mathcal{H} = p\dot{u} - \left(\frac{1}{2}\rho\dot{u}^2 - \frac{1}{2}\gamma\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \right) = \frac{1}{2}\rho\dot{u}^2 + \frac{1}{2}\gamma\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2$$

これは、ラグランジアン連続極限から分かるように、(1)の連続極限です。なので、実際に H はハミルトニアンです。ただし、ハミルトニアン密度の本来の変数は $p, \partial u / \partial x$ なので

$$\mathcal{H} = \frac{1}{\rho}p^2 - \left(\frac{1}{2\rho}p^2 - \frac{1}{2}\gamma\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 \right) = \frac{1}{2\rho}p^2 + \frac{1}{2}\gamma\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2$$

となります。

連成振動の一般化として求めてきましたが、今度は数学よりの話から同じものを出します。そのために、汎関数の話をしておきます。

汎関数は関数 ϕ を変数に持つ関数 F です。簡単に言えば、関数 $f(x)$ は数値 α から別の数値 y への変換 (写像) で、汎関数 $F[\phi]$ は関数 ϕ から数値 y への変換です。なので、汎関数 F は、関数形 ϕ を変えるごとに数値が変わります。 $F[\phi]$ が数値になればいいので、汎関数は

$$F[\phi] = \int d\alpha \phi(\alpha)$$

とし、より一般的には $\phi(x)$ の組み合わせによらずとして

$$F[\phi] = \int d\alpha f(\phi(\alpha))$$

関数 ϕ の変数 α を積分することで左辺に x そのものの依存性が出なく、 ϕ に依存するようになっています (ϕ の形を変えれば $F[\phi]$ の値が変わる)。汎関数 F のときは () でなく [] がよく使われます。

汎関数 $F[\phi]$ の変分を

$$\delta F[\phi] = F[\phi + \delta\phi] - F[\phi] = \int d\alpha \frac{\delta F[\phi]}{\delta \phi(\alpha)} \delta \phi(\alpha) \quad (6)$$

と定義します。 $\delta\phi$ は関数 ϕ の関数形を少し変えるものです。 $\delta F[\phi] / \delta \phi$ は汎関数微分 (Functional derivative) と呼ばれます。汎関数の変化は関数 ϕ と変化させた関数 $\phi + \delta\phi$ との差として与えられていることから、汎関数の意味がはっきりすると思います。この定義は通常関数による $f(\alpha + \delta\alpha) - f(\alpha)$ を展開した場合が対応します。

汎関数微分が何をしてくれるのかははっきりさせるために、 $F[\phi + \delta\phi]$ を $F[\phi + \epsilon\eta]$ とし、 η は関数、 ϵ を微小量とします。こうすれば、 $F[\phi + \epsilon\eta]$ を ϵ の関数と見れるので、テーラー展開から

$$F[\phi + \epsilon\eta] = F[\phi] + \frac{dF}{d\epsilon} \Big|_{\epsilon=0} \epsilon + \dots$$

と出来ます。変分の定義から分かるように、第二項の微分部分が汎関数微分に対応します。なので、通常の微分の定義のようにするなら、例えば $\delta\phi = \epsilon\delta(y-x)$ と与えられているとし

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta\phi(x)} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{F[\phi(y) + \epsilon\delta(y-x)] - F(\phi(y))}{\epsilon}$$

と書けます。

また、 $\delta F[\phi]$ から $\delta\phi(x, t)$ は

$$\delta\phi(x, t) = \int d^3x' \delta^3(x-x') \delta\phi(x', t) = \int d^3x' \frac{\delta\phi(x, t)}{\delta\phi(x', t)} \delta\phi(x', t)$$

なので

$$\frac{\delta\phi(x, t)}{\delta\phi(x', t)} = \delta^3(x-x') \quad (7)$$

となっています。これはよく使うので覚えておくと便利です。

解析力学の「補足：変分問題」で触れているように作用は汎関数です。同じことを繰り返しておきます。まず、値 x を変数に持つ関数 $f(x)$ を考えます。この変数 x を微小に $x + \epsilon$ と変化させて

$$f(x + \epsilon) = f(x) + \frac{df(x)}{dx} \epsilon + \dots$$

と展開します。このとき、 $f(x + \epsilon)$ は ϵ の 1 次までで $f(x)$ のままになっているとするなら

$$\frac{df(x)}{dx} = 0$$

という条件を入れます。この条件は、 df/dx が 0 となる x の値 (極値) を求める式です。次に関数 $\phi(x, t)$ を変数に持つ関数 $F[\phi]$ を考えます。そうすると、関数 $\phi(x, t)$ を $\phi(x, t) + \epsilon(x, t)$ として

$$F[\phi + \epsilon] = F[\phi] + \int dt \int d^3x \frac{\delta F}{\delta\phi(x, t)} \epsilon(x, t) + \dots$$

と展開します。汎関数は x, t に依存しないので、 x と t の積分を行います。このとき

$$\frac{\delta F[\phi]}{\delta\phi(x, t)} = 0$$

という条件を入れれば、1 次までで $F[\phi + \epsilon] = F[\phi]$ です。この条件は $\delta F[\phi]/\delta\phi$ が 0 となる $\phi(x, t)$ の関数形を求める式です。

汎関数の話を踏まえて先に進みます。点粒子に対するラグランジアンは $q(t), \dot{q}(t)$ を変数に持つので、 q の関数形によって決まり、作用 S は q を変数に持つ汎関数で

$$S[q] = \int_{t_1}^{t_2} dt L(q(t), \dot{q}(t)), \quad \delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \delta L(q(t), \dot{q}(t))$$

δS は作用の変分です。 q の変数は t なので、ラグランジアンは $L(t)$ として時間 t で積分してると見れます。 $q(t)$ を $\phi(x, t)$ に置き換えると

$$\int_{t_1}^{t_2} dt L(t) = \int_{t_1}^{t_2} dt L(\phi(\mathbf{x}, t), \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t})$$

となりますが、これだと x の依存性が残ります。このため、 t_0 ($t_1 \leq t_0 \leq t_2$) に対して

$$L(t_0) = L[\phi, \frac{\partial \phi}{\partial t}] = \int d^3x \mathcal{L}(\phi(\mathbf{x}, t_0), \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t_0)}{\partial t})$$

として、 x の依存性を消す段階があるとします。 $L(t_0) = L[\phi, \partial\phi/\partial t]$ は t_0 が固定されているために、 $\phi, \partial\phi/\partial t$ を変数にする汎関数になるからです。つまり、解析力学での

汎関数 $S \Rightarrow$ 関数 L

から

汎関数 $S \Rightarrow$ 汎関数 $L \Rightarrow$ 関数 \mathcal{L}

という構造に変化させます。というわけで、作用は

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt L = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \mathcal{L}$$

となり、 \mathcal{L} はラグランジアン密度です。

また、ラグランジアン密度が $\nabla\phi$ にも依存していても、

$$L[\phi, \frac{\partial \phi}{\partial t}] = \int d^3x \mathcal{L}(\phi, \nabla\phi, \frac{\partial \phi}{\partial t})$$

となります。これは、右辺において ϕ は t が固定された x の関数になっているので、関数形 ϕ を与えれば $\nabla\phi$ の形が決まるからです。

オイラー・ラグランジュ方程式を求めます。上で行ったことを汎関数で繰り返します。 t を固定したとき、汎関数のラグランジアン $L[\phi, \dot{\phi}]$ の変分は、変数が ϕ と $\dot{\phi}$ なので (6) から (「 \cdot 」は t の偏微分)

$$\delta L[\phi, \dot{\phi}] = \int d^3x \left(\frac{\delta L}{\delta \phi(\mathbf{x}, t)} \delta \phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} \delta \dot{\phi}(\mathbf{x}, t) \right) \quad (8)$$

これを t で積分すれば作用の変分 δS になるので

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \delta L[\phi, \dot{\phi}] = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \left(\frac{\delta L}{\delta \phi(\mathbf{x}, t)} \delta \phi(\mathbf{x}, t) + \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} \delta \dot{\phi}(\mathbf{x}, t) \right)$$

これに

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}} \delta \phi \right) = \frac{\partial}{\partial t} \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}} \delta \phi + \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}} \delta \dot{\phi}$$

を使って

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \left(\frac{\delta L}{\delta \phi} \delta \phi + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}} \delta \phi \right) - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}} \delta \phi \right)$$

t_1, t_2 で $\delta \phi(\mathbf{x}, t_1) = \delta \phi(\mathbf{x}, t_2) = 0$ という条件を加えて

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \int d^3x \left(\frac{\delta L}{\delta \phi(\mathbf{x}, t)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} \right) \delta \phi(\mathbf{x}, t)$$

よって、最小作用の原理より

$$\frac{\delta L}{\delta \phi(\mathbf{x}, t)} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} = 0$$

これが汎関数でのオイラー・ラグランジュ方程式です。ラグランジアン密度を使ったオイラー・ラグランジュ方程式とは

$$\begin{aligned} \frac{\delta L}{\delta \phi(\mathbf{x}, t)} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi(\mathbf{x}, t)} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \phi(\mathbf{x}, t))} \\ \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} \end{aligned}$$

と対応しています。また、作用の汎関数微分は

$$\frac{\delta S}{\delta \phi} = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi(\mathbf{x}, t)} - \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial (\nabla \phi(\mathbf{x}, t))} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}(\mathbf{x}, t)} = 0$$

となることも分かります。

ハミルトン形式も同様に汎関数で書けます。 $\phi(\mathbf{x}, t)$ の正準共役な場を

$$\pi(\mathbf{x}, t) = \frac{\delta L(t)}{\delta \dot{\phi}(\mathbf{x}, t)}$$

と定義します。 π の時間微分はオイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{\delta L}{\delta \phi} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}} = 0$$

から

$$\dot{\pi}(\mathbf{x}, t) = \frac{\delta L}{\delta \phi(\mathbf{x}, t)}$$

そして、ハミルトニアン H とハミルトニアン密度 \mathcal{H} は

$$H[\phi, \pi] = \int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \dot{\phi}(\mathbf{x}, t) - L[\phi, \dot{\phi}] = \int d^3x \mathcal{H}(\phi(\mathbf{x}, t), \pi(\mathbf{x}, t), \nabla\phi(\mathbf{x}, t), \nabla\pi(\mathbf{x}, t)) \quad (9)$$

これは汎関数のルジャンドル変換です。

ここまでくれば正準方程式も解析力学での形と同じになることは予想できて

$$\dot{\phi} = \frac{\delta H}{\delta \pi}, \quad \dot{\pi} = -\frac{\delta H}{\delta \phi}$$

まじめに変分から求めるなら

$$\begin{aligned} \delta H &= \delta \left(\int d^3x \pi(\mathbf{x}, t) \dot{\phi}(\mathbf{x}, t) - L \right) \\ &= \int d^3x (\delta\pi \dot{\phi} + \pi \delta\dot{\phi}) - \delta L \\ &= \int d^3x (\delta\pi \dot{\phi} + \pi \delta\dot{\phi}) - \int d^3x \left(\frac{\delta L}{\delta \phi} \delta\phi + \frac{\delta L}{\delta \dot{\phi}} \delta\dot{\phi} \right) \\ &= \int d^3x \delta\pi \dot{\phi} + \pi \delta\dot{\phi} - \int d^3x (\dot{\pi} \delta\phi + \pi \delta\dot{\phi}) \\ &= \int d^3x (\dot{\phi} \delta\pi - \dot{\pi} \delta\phi) \end{aligned}$$

この結果と、 H の変数が ϕ と π なので、汎関数 H の変分

$$\delta H = \int d^3x \left(\frac{\delta H}{\delta \phi} \delta\phi + \frac{\delta H}{\delta \pi} \delta\pi \right)$$

とを比べればいいです。

また、ハミルトニアン密度 \mathcal{H} は $\phi, \pi, \nabla\phi, \nabla\pi$ に依存していることから

$$\begin{aligned} \delta H &= \int d^3x \mathcal{H}(\phi, \pi, \nabla\phi, \nabla\pi) \\ &= \int d^3x \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} \delta\phi + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} \delta\pi + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla\phi)} \delta\nabla\phi + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla\pi)} \delta\nabla\pi \right) \\ &= \int d^3x \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} \delta\phi + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} \delta\pi + \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla\phi)} \delta\phi \right) - \nabla \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla\phi)} \delta\phi + \nabla \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla\pi)} \delta\pi \right) - \nabla \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla\pi)} \delta\pi \right) \\ &= \int d^3x \left(\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} \delta\phi + \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} \delta\pi - \nabla \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla\phi)} \delta\phi - \nabla \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla\pi)} \delta\pi \right) \end{aligned}$$

これと比べることで、ハミルトニアンの汎関数微分とハミルトニアン密度は

$$\begin{aligned} \frac{\delta H}{\delta \phi} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi} - \nabla \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla\phi)} \\ \frac{\delta H}{\delta \pi} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \pi} - \nabla \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial(\nabla\pi)} \end{aligned}$$

となっています。

ポアソン括弧も定義しておきます。解析力学からの変更と同じように、汎関数 $F[\phi, \pi], G[\phi, \pi]$ のポアソン括弧は

$$\{F, G\}_P = \int d^3x \left(\frac{\delta F}{\delta \phi(\mathbf{x}, t)} \frac{\delta G}{\delta \pi(\mathbf{x}, t)} - \frac{\delta F}{\delta \pi(\mathbf{x}, t)} \frac{\delta G}{\delta \phi(\mathbf{x}, t)} \right)$$

と定義します。時間微分との関係は

$$\dot{F} = \int d^3x \left(\frac{\delta F}{\delta \phi} \dot{\phi} + \frac{\delta F}{\delta \pi} \dot{\pi} \right) = \{F, H\}_P$$

と与えられます。 ϕ, π は独立なので

$$\frac{\delta \phi(\mathbf{x}, t)}{\delta \pi(\mathbf{x}', t)} = \frac{\delta \pi(\mathbf{x}, t)}{\delta \phi(\mathbf{x}', t)} = 0$$

そして、(7) を使うと

$$\begin{aligned} \dot{\phi}(x, t) &= \{\phi(x, t), H\}_P = \int d^3x' \left(\frac{\delta \phi(x, t)}{\delta \phi(x', t)} \frac{\delta H}{\delta \pi(x', t)} - \frac{\delta \phi(x, t)}{\delta \pi(x', t)} \frac{\delta H}{\delta \phi(x', t)} \right) \\ &= \int d^3x' \delta^3(x - x') \frac{\delta H}{\delta \pi(x', t)} \\ &= \frac{\delta H}{\delta \pi(x, t)} \end{aligned}$$

同様に

$$\dot{\pi}(x, t) = -\frac{\delta H}{\delta \phi(x, t)}$$

$\phi(x, t)$ と $\pi(x, t)$ との関係は

$$\begin{aligned} \{\phi(x, t), \pi(x', t)\}_P &= \int d^3x'' \left(\frac{\delta \phi(x, t)}{\delta \phi(x'', t)} \frac{\delta \pi(x', t)}{\delta \pi(x'', t)} - \frac{\delta \phi(x, t)}{\delta \pi(x'', t)} \frac{\delta \pi(x', t)}{\delta \phi(x'', t)} \right) \\ &= \int d^3x'' \frac{\delta \phi(x, t)}{\delta \phi(x'', t)} \frac{\delta \pi(x', t)}{\delta \pi(x'', t)} \\ &= \int d^3x'' \delta^3(x - x'') \delta^3(x' - x'') \\ &= \delta^3(x - x') \end{aligned}$$

ϕ, π 同士では

$$\{\phi(x, t), \phi(x', t)\}_P = \{\pi(x, t), \pi(x', t)\}_P = 0$$

量子力学での量子化では正準変数のポアソン括弧を交換関係にしたように、今のポアソン括弧から場の量子化が行われます。

最後に、ラグランジアン密度の変数を $\phi, \partial_\mu \phi$ としている理由に触れておきます。4次元の表記を使います。まず、当たり前のように x のみを変数にしていますが、

$$\mathcal{L}(\phi(x)) = \int dy \mathcal{L}(\phi(x), \phi(y))$$

のような形も考えられます。このように、1つの位置だけでなく複数の位置に依存している場合を nonlocal と言い、1つの位置に依存している場合を local と言います。通常、場の量子論では local な場合だけを扱います。理由は local な場合だけで大抵上手くいくからです。

微分の依存性を $\partial_\mu \phi$ で止めてますが、一般的にはより高階の項を含めていいはずですが、しかし、高階があると nonlocal になると考えられます。例えば $y^\mu \neq 0$ での nonlocal な項 $\phi(x+y)$ は、 $\phi(x+y)$ の $y=0$ 周りで展開すると

$$\phi(x+y) = \phi(x) + y^\mu \partial_\mu \phi(x) + \frac{1}{2} y^\mu y^\nu \partial_\mu \partial_\nu \phi(x) + \dots$$

として、 $\phi(x)$ の全ての微分を含んだものと見れます。なので、高階微分は nonlocal になると考えて、1階微分までを使います。

高階を含めないもう1つの理由は相対論の因果律 (光速を超えて情報は伝達しない) のためです。オイラー・ラグランジュ方程式が3階微分方程式になるとき、因果律を満たさない例があります (ローレンツ・ディラック方程式)。

また、相対論から、ローレンツ変換で作用が不変というのも要求されています。これは単純で、ラグランジアン密度がスカラーになっていればいいです (スカラーならローレンツ変換で不変)。さらに、ラグランジアン密度は実数であることが要求されます。これは、エルミート演算子にしたいからです。