

有限密度でのフェルミオン～別形式～

密度ありでの定式化における別形式を説明していきます。形式の違いは、簡単にいうと時間発展演算子として何を使うのかということによって生じます。知らなければ知らないですむ話なので、余計な混乱を生みそうだと思う人は流してください。

ここでは実時間でのファインマン伝播関数を伝播関数、虚時間でのファインマン伝播関数を温度グリーン関数のように書いています。

他のところでもそうですが、久保-Martín-Schwinger の関係を周期的条件とか境界条件と呼んでいます。

ここでの形式は虚時間法ではそのまま使うことが出来ません。

表記を簡単にするために $|\langle n|\psi|m\rangle|^2$ と書いていますが、絶対値にはなっていません。

最初に「有限密度でのフェルミオン」の最初に示した虚時間での経路積分表示を実時間にした場合を示しておきます (簡単のために実数場だとしてしまいます)。これは虚時間を実時間に戻せばいいだけで

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \int \mathcal{D}\pi \exp \left[i \int_C dt \int d^3x \left(i\pi \frac{\partial \phi}{\partial \tau} - \mathcal{H}(\pi, \phi) + \mu \mathcal{N}(\pi, \phi) \right) \right]$$

$$Z = \text{tr} e^{-\beta \hat{K}} \quad (K = H - \mu N)$$

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

となっています。これは実時間なので、通常経路積分を作る時の方法と同じようにして導けます (実時間で定式化ができる理由や時間経路 C については「実時間法」参照)。その導出時では、ハイゼンベルグ描像での場の演算子 $\phi_H(t, \mathbf{x})$ はハミルトニアン演算子と

$$[\hat{H} - \mu \hat{N}, \hat{\phi}_H] = -i \frac{\partial \hat{\phi}_H}{\partial t}$$

このように交換するとしています (ハイゼンベルグ方程式)。このため、シュレーディンガー描像 $\hat{\phi}_S(\mathbf{x})$ とハイゼンベルグ描像 $\hat{\phi}_H(t, \mathbf{x})$ の関係は

$$\hat{\phi}_H(t, \mathbf{x}) = e^{i(H-\mu N)t} \hat{\phi}_S(\mathbf{x}) e^{-i(H-\mu N)t}$$

となっています。通常と異なっているのは時間発展演算子がハミルトニアン単体でなく、 μN がくっついている点で、それに対応させるようにハイゼンベルグ方程式を修正しています。なので、ハイゼンベルグ描像での場の演算子は通常場の理論でのハイゼンベルグ描像での場の演算子とは異なっています。

このように時間発展演算子として $K = H - \mu N$ を使ってしまうと、単純にハミルトニアンを $H - \mu N$ に置き換えればいいだけなのが分かり、上での経路積分表示になることがすぐに分かります。次に時間発展演算子として K でなく、 H 単体を使った場合ではどうなるのかを見ていきます。途中計算自体は通常経路積分とそれほど変わらないので省きます。

コヒーレント状態 (複素平面での実時間 t を使います) として

$$|\eta\rangle = \exp \left[\int d^3x \psi^\dagger(t=0, \mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}) \right] |0\rangle, \quad \psi(t=0, \mathbf{x}) |\eta\rangle = \eta(\mathbf{x}) |\eta\rangle$$

$$\int d\eta^\dagger d\eta |\eta\rangle \langle \eta| \exp \left[\int d^3x \eta^\dagger(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}) \right] = 1$$

$$\text{tr} A = - \int d\eta^\dagger d\eta \exp \left[- \int d^3x \eta^\dagger(\mathbf{x}) \eta(\mathbf{x}) \right] \langle \eta | A | \eta \rangle$$

これらを使って経路積分の表示に持っていくこととなります (ψ は演算子としています)。注意ですが、トレースの式でマイナスがついていますが、 $-\langle \eta|A|\eta \rangle = \langle \eta|A|(-\eta) \rangle$ となっています。これはグラスマン数の反交換性から来ていて、トレースに関して反周期性があることを表しています。この反周期性が、フェルミオンでの久保-Martin-Schwinger の関係にマイナスがつくことに対応します。

経路積分の定式化において、時間発展の演算子としてハミルトニアン H を使います。上でも言ったようにここが分かれ道で、時間発展演算子としてハミルトニアンを使うか、化学ポテンシャルを含めた $K = H - \mu N$ を使うかで状況が変わります。もし、 K を時間発展演算子なのだと思えば、単に H が K に置き換わるだけなので、素直に上で示した経路積分の形になります。これに対して、ハミルトニアン H を時間発展演算子だとすると一段複雑になります。と言っても、 μN の作用の仕方が

$$e^{\beta\mu N}|\eta\rangle = |e^{\beta\mu}\eta\rangle, \langle\eta|e^{\beta\mu N} = \langle e^{\beta\mu}\eta|$$

となっていることを踏まえればいいだけです。この形式で行っていくと、化学ポテンシャルが状態の中にいるために、経路積分は

$$Z = \int \mathcal{D}\eta^\dagger \mathcal{D}\eta \exp \left[i \int_C dt \int d^3x (i\eta^\dagger \frac{d\eta}{dt} - \mathcal{H}) \right]$$

という形になります (時間経路 C は無視していいです。気になる人は「実時間法」を見てください)。見て分かるようにこの式には、 \exp 内に化学ポテンシャルの項がありません。素直にディラック方程式を適用してみても

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\eta} \mathcal{D}\eta \exp \left[i \int_C dt \int d^3x \bar{\eta} (i\gamma_\mu \partial^\mu - m) \eta \right] \quad (1)$$

となって化学ポテンシャルの項は出てきません。それではどこに化学ポテンシャルがいるのかというと、場 ψ の固有値 η において、 η に対する境界条件

$$\eta(t, \mathbf{x}) = -e^{\beta\mu}\eta(t - i\beta, \mathbf{x}) \quad (2)$$

に含まれています。これは、トレースが $\langle \eta|A|(-\eta) \rangle$ であることと、 $e^{\beta\mu N}|\eta\rangle = |e^{\beta\mu}\eta\rangle$ であることから分かります。

というわけで、時間発展演算子としてハミルトニアンのみを使うと、グリーン関数の周期的条件 (久保-Martin-Schwinger の関係) にも μ が現れて、グリーン関数の解が μ がない場合から変更されます。このように時間発展演算子に H か K を使うかという、ちょっとした違いで形式が変わってしまいます。しかし、この二つは簡単に対応させることができます。ここから最初の時間発展演算子として $K = H - \mu N$ を使った場合を K の形式、 H を使った場合を H の形式と呼んでいきます。

K と H の形式は単純な関係によって対応付けられます。これは周期的条件から分かります。 K の形式では、場 $\eta'(t, \mathbf{x})$ の周期的条件は当然

$$\eta'(t, \mathbf{x}) = -\eta'(t - i\beta, \mathbf{x}) \quad (3)$$

という形をしています (H を K に置き換えるだけだから)。ということは、 η を

$$\eta(t, \mathbf{x}) \Rightarrow \eta'(t, \mathbf{x}) = e^{i\mu t}\eta(t, \mathbf{x}) \quad (4)$$

と置き換えてしまえばいいことが分かります。なぜなら、これによって

$$\eta(t, \mathbf{x}) = -e^{\beta\mu}\eta(t - i\beta, \mathbf{x}) \Rightarrow e^{-i\mu t}\eta'(t, \mathbf{x}) = -e^{\beta\mu}e^{-i\mu(t-i\beta)}\eta'(t - i\beta, \mathbf{x})$$

$$\eta'(t, \mathbf{x}) = -\eta'(t - i\beta, \mathbf{x})$$

というように書き換えられるからです。この対応 $\eta'(t, \mathbf{x}) = e^{i\mu t}\eta(t, \mathbf{x})$ はフェルミオン場の振動が μt だけ変化することを言っています。平面波 $\exp(-i\omega t)$ を考えれば ω が振動数なので、振動数が $\omega - \mu$ と変わることが分かります。つまり、 η, η' では振動数が異なったフェルミオン場を見ていることになります。そして、境界条件 (2) では、 $\eta(t, \mathbf{x})$ から $\eta(t - i\beta)$ にいっても振動数が μ ずれているために元に戻らなく、元にもどるためにはさらに $e^{\beta\mu}$ だけ位相をずらせと言ってるのだととれます (後でもう少し平面波解については触れます)。これ以降も「'」の付いた場やグリーン関数は K の形式のものだとします。

H の形式から K の形式へは、実時間の場合で、経路積分上で $\eta'(t, \mathbf{x}) = e^{i\mu t}\eta(t, \mathbf{x})$ とすることで

$$Z = \int \mathcal{D}\bar{\eta}' \mathcal{D}\eta' \exp\left[i \int_C dt \int d^3x \bar{\eta}' (i\gamma_0(\partial_0 - i\mu) + i\gamma_i \partial^i - m)\eta'\right]$$

このようになります (測度は変わらない)。そして、 t を $\tau = it$ と解析接続すれば

$$\int \mathcal{D}\bar{\eta}' \mathcal{D}\eta' \exp\left[\int_0^\beta d\tau \int d^3x \bar{\eta}' \left(-\gamma_0 \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu\right) + i\gamma_i \partial^i - m\right)\eta'\right]$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = i \frac{\partial}{\partial \tau}, \quad dt = -i d\tau$$

となって「虚時間法～ディラック場～」で使った形と一致します ($\gamma_i \partial^i = \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla$)。というわけで、二つの形式の差は (4) によって対応づけられます。このことから分かるように、密度なしの経路積分の式は、 $\eta'(t, \mathbf{x}) = e^{i\mu t}\eta(t, \mathbf{x})$ と置き換えるだけで密度ありの経路積分の形になります (場に対する境界条件も変化することに注意)。

また、場の置き換え $\eta'(\tau, \mathbf{x}) = e^{i\mu \tau}\eta(\tau, \mathbf{x})$ によってフーリエ変換

$$\eta'(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \eta'(p) e^{-ipx}$$

を

$$\eta(t, \mathbf{x}) = e^{-i\mu t}\eta'(t, \mathbf{x}) \Rightarrow e^{-i\mu t}\eta'(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \eta'(p) e^{-i\mu t} e^{-ipx}$$

$$\eta(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \eta'(p) e^{-i(p_0 + \mu)t + i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} \quad (5)$$

逆では

$$e^{i\mu t}\eta(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \eta(p) e^{i\mu t} e^{-ipx}$$

$$\eta'(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \eta(p) e^{-i(p_0 - \mu)t + i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}$$

このように変更することで、 $\eta(t, \mathbf{x})$ と $\eta'(t, \mathbf{x})$ をフーリエ変換の実行で行き来させることができます。この2つの左辺を見れば位置表示の立場からは、時間発展演算子 K と H で $\mu N t$ だけずれているために時間ずれていると言えます。右辺では運動量表示の立場から、場の振動数 (エネルギー) を μ 動かしたと見れて、こっちの方が状況ははっきりします。なぜなら上でも言ったように、 $\eta(x)$ と $\eta'(x)$ は振動数を μ ずらしたものと解釈できるからです。つまり、通常のフーリエ変換を行うと振動数が μ ずれたままの状況で計算してしまうので、フーリエ変換に μ の補正を入れることで、同じ振動数にいくように変換されます (これも平面波解が異なっているせい)。この変換によって、 H での経路積分の \exp 部分は

$$\begin{aligned}
\int d^4x \bar{\eta}(x)(i\gamma_0\partial_0 + i\gamma_i\partial^i - m)\eta(x) &= \int d^4x \int \frac{d^4pd^4q}{(2\pi)^8} \\
&\quad \times \bar{\eta}(p)\eta(q)e^{i(p_0+\mu)t-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}(i\gamma_0\partial_0 + i\gamma_i\partial^i - m)e^{-i(q_0+\mu)t+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} \\
&= \int \frac{d^4pd^4q}{(2\pi)^4} \bar{\eta}(p)\eta(q)\delta(p_0 - q_0)\delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{q})(\gamma_0(q_0 + \mu) - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{q} - m) \\
&= \int \frac{d^4p}{(2\pi)^4} \bar{\eta}(p)(\gamma_0(p_0 + \mu) - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} - m)\eta(p)
\end{aligned}$$

というように、 K での形式の運動量表示になります。

経路積分上での話はここまでにして、時間発展演算子として H を使って「有限温度でのグリーン関数」と同じことをしてみます。実時間での 2 点関数の定義は同じで (ここから ψ を場と演算子の両方で使っていきます)

$$S(x, y) = \theta(x_0 - y_0)S^>(x, y) + \theta(y_0 - x_0)S^<(x, y)$$

$$S^>(x, y) = \langle \psi(x)\bar{\psi}(y) \rangle_\beta, \quad S^<(x, y) = -\langle \bar{\psi}(y)\psi(x) \rangle_\beta$$

熱的平均も

$$\langle \psi(x)\bar{\psi}(y) \rangle_\beta = Z^{-1}\text{tr}[e^{-\beta(H-\mu N)}\psi(x)\bar{\psi}(y)]$$

となっています ($\psi(x)$ はハイゼンベルグ描像)。場 $\psi(x)$, $\bar{\psi}(y)$ は周期性 $\psi(t, \mathbf{x}) = -e^{\beta\mu}\psi(t - i\beta, \mathbf{x})$ によるものであることに注意してください。このため、 $\psi(t, \mathbf{x}) = -\psi(t - i\beta, \mathbf{x})$ の周期性を持つ熱的平均と直接対応していません。このときの久保-Martin-Schwinger の関係を時間発展演算子が H だとして求めてみると

$$\begin{aligned}
S^>(x, y) &= \langle \psi(x)\bar{\psi}(y) \rangle_\beta = Z^{-1}\text{tr}[e^{-\beta(H-\mu N)}\psi(x)\bar{\psi}(y)] \\
&= Z^{-1}\text{tr}[\bar{\psi}(y)e^{-\beta H}e^{\beta\mu N}\psi(x)] \\
&= Z^{-1}\text{tr}[\bar{\psi}(y)e^{-\beta H}\psi(x)e^{\beta\mu N-\beta\mu}] \\
&= Z^{-1}\text{tr}[\bar{\psi}(y)e^{-\beta H}\psi(x)e^{\beta H}e^{-\beta H}e^{\beta\mu N-\beta\mu}] \\
&= Z^{-1}\text{tr}[\bar{\psi}(y)\psi(t + i\beta, \mathbf{x})e^{-\beta H}e^{\beta\mu N-\beta\mu}] \\
&= e^{-\beta\mu}Z^{-1}\text{tr}[\bar{\psi}(y)\psi(t + i\beta, \mathbf{x})e^{-\beta(H-\mu N)}] \\
&= e^{-\beta\mu}\langle \bar{\psi}(y)\psi(t + i\beta, \mathbf{x}) \rangle_\beta \\
&= -e^{-\beta\mu}S^<(t + i\beta, \mathbf{x}; y)
\end{aligned} \tag{6}$$

途中で交換関係

$$\begin{aligned}
[N, \psi(y)] &= \int d^3x [\psi^\dagger(x)\psi(x), \psi(y)] = \int d^3x (\psi^\dagger(x) \{ \psi^\dagger(x) \{ \psi(x), \psi(y) \} - \{ \psi^\dagger(x), \psi(y) \} \psi(x)) \\
&= - \int d^3x \{ \psi^\dagger(x), \psi(y) \} \psi(x) \\
&= - \int d^3x \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \psi(x) \\
&= - \psi(y)
\end{aligned}$$

$$([AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B, \{ \psi(t, \mathbf{x}), \psi^\dagger(t, \mathbf{y}) \} = \delta^3(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \{ \psi(t, \mathbf{x}), \psi(t, \mathbf{y}) \} = 0)$$

とハウストルフの公式

$$e^{\alpha N} \phi(x) e^{-\alpha N} = e^{-\alpha} \phi(x)$$

を使っています (粒子数演算子 N の時間は定数であればいいので、 t に合わせることで同時刻交換関係が使える)。これはフェルミオン場の反周期性 (4) に対応した結果になります。

久保-Martin-Schwinger の関係 (6) とフーリエ変換によって

$$\begin{aligned}
S^>(p_0) &= \int dt e^{ip_0 t} S^>(t) = -e^{-\beta\mu} \int dt e^{ip_0 t} S^<(t + i\beta) \\
&= -e^{-\beta\mu} \int dt e^{ip_0 t} S^<(t + i\beta) \\
&= -e^{-\beta\mu} \int dt e^{ip_0 t} e^{p_0\beta} e^{-p_0\beta} S^<(t + i\beta) \\
&= -e^{-\beta\mu} e^{p_0\beta} \int dt e^{ip_0(t+i\beta)} S^<(t + i\beta) \\
&= -e^{\beta(p_0 - \mu)} S^<(p_0)
\end{aligned}$$

もしくは

$$S^<(p_0) = \int dt e^{ip_0 t} S^<(t) = -e^{\beta\mu} \int dt e^{ip_0 t} S^<(t + i\beta)$$

から行えば、当たり前ですが

$$S^<(p_0) = -e^{-\beta(p_0 - \mu)} S^>(p_0) \quad (7)$$

$S^>(x)$ についてももう少し詳しく見ておきます。ここからは特に断らない限り、相互作用はないとします。まず、「補足：実時間の伝播関数」でのボソンの結果をフェルミオンだとして、同じことをしていきます。フェルミオンの分配関数は

$$Z = \text{tr}(e^{-\beta(H - \mu N)}) = \sum_{n=0}^1 \langle n | e^{-\beta(H - \mu N)} | n \rangle = \prod_i \sum_{n=0}^1 (e^{-\beta(E_{\mathbf{p}_i} - \mu n)}) = \prod_i (1 + e^{-\beta(E_{\mathbf{p}_i} - \mu)})$$

これによってフェルミオンの生成、消滅演算子 a^\dagger, a とすれば、粒子数演算子は $N = a^\dagger a$ であるので、 $a^\dagger(\mathbf{p})a(\mathbf{p})$ の熱平均は

$$\begin{aligned}
\langle a^\dagger(\mathbf{p})a(\mathbf{p}) \rangle_\beta &= \frac{\text{tr}(e^{-\beta(H-\mu N)} a^\dagger(\mathbf{p})a(\mathbf{p}))}{Z} \\
&= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \log Z \\
&= \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu} \log[1 + e^{-\beta(E_{\mathbf{p}}-\mu)}] \\
&= \frac{1}{\beta} \frac{\beta e^{-\beta(E_{\mathbf{p}}-\mu)}}{1 + e^{-\beta(E_{\mathbf{p}}-\mu)}} \\
&= \frac{1}{e^{\beta(E_{\mathbf{p}}-\mu)} + 1} \\
&= n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)
\end{aligned}$$

$\langle a(\mathbf{p})a^\dagger(\mathbf{p}) \rangle_\beta$ は反交換関係から

$$\langle a(\mathbf{p})a^\dagger(\mathbf{p}) \rangle_\beta = 1 - n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)$$

反フェルミオンでの生成、消滅演算子 b^\dagger, b の場合では μ の符号を反転させればいいので (反粒子は電荷が逆だから)

$$\langle b^\dagger(\mathbf{p})b(\mathbf{p}) \rangle_\beta = n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu), \quad \langle b(\mathbf{p})b^\dagger(\mathbf{p}) \rangle_\beta = 1 - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu)$$

となります。運動量を区別するなら

$$\langle a^\dagger(\mathbf{p})a(\mathbf{k}) \rangle_\beta = (2\pi)^3 n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu) \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{k}), \quad \langle a(\mathbf{p})a^\dagger(\mathbf{k}) \rangle_\beta = (2\pi)^3 (1 - n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)) \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{k})$$

$$\langle b^\dagger(\mathbf{p})b(\mathbf{k}) \rangle_\beta = (2\pi)^3 n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu) \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{k}), \quad \langle b(\mathbf{p})b^\dagger(\mathbf{k}) \rangle_\beta = (2\pi)^3 (1 - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu)) \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{k})$$

これを場の量子論での「伝播関数について」と「ディラック場～伝播関数～」の関係を使って平面波展開すると

$$\begin{aligned}
\langle \psi(x)\bar{\psi}(y) \rangle_\beta &= \left\langle \int \frac{d^3p d^3k}{(2\pi)^6} \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}\sqrt{2E_{\mathbf{k}}}} (a(\mathbf{p})u^s e^{-ipx} + b^\dagger(\mathbf{p})v^s e^{ipx})(a^\dagger(\mathbf{k})\bar{u}^r e^{iky} + b(\mathbf{k})\bar{v}^r e^{-iky}) \right\rangle_\beta \\
&= \int \frac{d^3p d^3k}{(2\pi)^6} \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}\sqrt{2E_{\mathbf{k}}}} \langle a_{\mathbf{p}} a_{\mathbf{k}}^\dagger \sum_{r=1,2} u^r \bar{u}^r e^{-ipx} e^{iky} + b_{\mathbf{p}}^\dagger b_{\mathbf{k}} \sum_{r=1,2} v^r \bar{v}^r e^{ipx} e^{-iky} \rangle_\beta \\
&= \int \frac{d^3p d^3k}{(2\pi)^6} \frac{(2\pi)^3}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}\sqrt{2E_{\mathbf{k}}}} \\
&\quad \times [(\not{p} + m)(1 - n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)) \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{k}) e^{-ipx} e^{iky} + (\not{p} - m)n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu) \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{k}) e^{ipx} e^{-iky}] \\
&= (i\not{\partial} + m)e^{-ip(x-y)} + (-i\not{\partial} - m)e^{ip(x-y)} \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\not{\partial} + m) [(1 - n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)) e^{-ip(x-y)} - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu) e^{ip(x-y)}]
\end{aligned}$$

$$(p_0 = E_{\mathbf{p}} = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}, k_0 = E_{\mathbf{k}} = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m^2})$$

となります (面倒だったので、2行目で u, v のスピン成分はそろえてしまっています)。 $\psi(x)$ は通常のディラック方程式

$$(i\gamma_\mu \partial^\mu - m)\psi(x) = 0$$

に従っています。 $\langle \bar{\psi}(y)\psi(x) \rangle_\beta$ は

$$\begin{aligned} \langle \bar{\psi}(y)\psi(x) \rangle_\beta &= \int \frac{d^3p d^3k}{(2\pi)^6} \frac{1}{\sqrt{2E_{\mathbf{p}}}\sqrt{2E_{\mathbf{k}}}} (a^\dagger(\mathbf{k})\bar{u}^r e^{iky} + b(\mathbf{k})\bar{v}^r e^{-iky}) (a(\mathbf{p})u^s e^{-ipx} + b^\dagger(\mathbf{p})v^s e^{ipx}) \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\cancel{\partial} + m) [n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu) e^{-ip(x-y)} - (1 - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu)) e^{ip(x-y)}] \end{aligned}$$

よって

$$S^>(x, y) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\cancel{\partial} + m) [(1 - n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)) e^{-ip(x-y)} - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu) e^{ip(x-y)}] \quad (8a)$$

$$S^<(x, y) = - \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\cancel{\partial} + m) [n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu) e^{-ip(x-y)} - (1 - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu)) e^{ip(x-y)}] \quad (8b)$$

$$(p_0 = E_{\mathbf{p}})$$

これは方程式

$$(i\gamma_0 \partial_0 + \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - m)S^>(x, y) = 0, \quad (i\gamma_0 \partial_0 + \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - m)S^<(x, y) = 0 \quad (9)$$

と境界条件

$$S^>(t, \mathbf{x}; y) = -e^{-\beta\mu} S^<(t + i\beta, \mathbf{x}; y)$$

に従う解になっています。 $S^>, S^<$ にディラック方程式を作用させるとゼロになるというのは通常の性質です (場の量子論の「伝播関数について」参照)。実際に

$$\begin{aligned} &(i\gamma_0 \partial_0 + i\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - m)S^>(x) \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\cancel{\partial} + m) \\ &\quad \times [(\gamma_0 E_{\mathbf{p}} - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} - m)(1 - n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)) e^{-iE_{\mathbf{p}}t + i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} - (-\gamma_0 E_{\mathbf{p}} + \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} - m)n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu) e^{iE_{\mathbf{p}}t - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}] \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} [(E_{\mathbf{p}}^2 - \mathbf{p}^2 - m^2)(1 - n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)) e^{-iE_{\mathbf{p}}t + i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}} + (E_{\mathbf{p}}^2 - \mathbf{p}^2 - m^2)n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu) e^{iE_{\mathbf{p}}t - i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}}] \\ &= 0 \end{aligned}$$

となり、境界条件に対しては

$$\begin{aligned}
-e^{-\beta\mu} S^<(t+i\beta, \mathbf{x}) &= e^{-\beta\mu} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} [n_F(E_p - \mu) e^{-iE_p t + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} e^{\beta E_p} - (1 - n_F(E_p + \mu)) e^{iE_p t - i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} e^{-\beta E_p}] \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} [n_F(E_p - \mu) e^{\beta(E_p - \mu)} e^{-iE_p t + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} - (1 - n_F(E_p + \mu)) e^{-\beta(E_p + \mu)} e^{iE_p t - i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}] \\
&= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} [(1 - n_F(E_p - \mu)) e^{-iE_p t + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} - n_F(E_p + \mu) e^{iE_p t - i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}]
\end{aligned}$$

となって一致します ($i\partial\!\!\!/ + m$ は省いて書いています)。途中で分布関数の関係

$$e^{\beta(E-\mu)} n_F(E-\mu) = 1 - n_F(E-\mu)$$

$$e^{-\beta(E+\mu)} (1 - n_F(E+\mu)) = n_F(E+\mu)$$

を使っています。このように境界条件を考慮せずに求めてもちゃんと境界条件を満たした結果が導けます。これは導出において、ハミルトニアンとして H を使用したことと反交換関係を使っているために、自然と境界条件 (境界条件は時間発展演算子として H を使ったことと反交換関係から出てくる) を満たす結果になったとみなせます。

現在のディラック方程式、境界条件に対してはこのように求まりましたが、ディラック方程式に μ を含ませるなら、場が

$$(i\gamma_0(\partial_0 - i\mu) + i\boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla - m)\psi'(x) = 0, \quad \psi'(x) = -\psi'(t+i\beta, \mathbf{x})$$

これを満たしているとします (時間発展演算子として K を使った場合に対応)。つまり $\langle a(\mathbf{p})a^\dagger(\mathbf{p}) \rangle_\beta$ は変更されませんが、 $\psi(x)$ が変更されます。変更自体は単純で、感覚的に言うと、平面波展開したとき p_0 に $\pm\mu$ がくっついてくるだけです。なので、 $\psi'(x)$ による $S^{>'}(x)$ は

$$S^{>'}(x) = \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_p} (i\gamma_0\partial_0 + \gamma_0\mu + \boldsymbol{\gamma}\cdot\nabla + m) e^{i\mu t} [(1 - n_F(E_p - \mu)) e^{-iE_p t + \mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} - n_F(E_p + \mu) e^{iE_p t - \mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}] \quad (10)$$

となって、「有限密度でのフェルミオン」で求めた虚時間版を実時間にしたものと一致します。導出時に気をつける点は平面波展開が上の場合と違い

$$\psi' = u e^{-i(p_0 - \mu)x_0} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}, \quad \psi' = v e^{i(p_0 + \mu)x_0} e^{-i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

となっていることです。こうなるのは静止系でのディラック方程式

$$(i\gamma_0(\partial_0 - i\mu) - m)\psi'(x) = 0$$

の解を考えれば予想できると思います。 u, v は

$$(\not{p} - m)u(p), \quad (\not{p} + m)v(p)$$

に従うので、 $u(p)\bar{u} = \not{p} - m, v\bar{v} = \not{p} + m$ のままです。結果を見比べれば、結局ここでも $e^{i\mu t}$ をつければ対応させられるようになっていて

$$S^{>'}(x, y) = e^{i\mu x_0} S^{>}(x, y) e^{-i\mu y_0}, \quad S^{<'}(x, y) = e^{i\mu x_0} S^{<}(x, y) e^{-i\mu y_0}$$

この二つの対応関係がそのまま伝播関数でも成立します。
次にスペクトル関数を導入していきます。定義は運動量表示で

$$\rho(p_0, \mathbf{p}) = S^>(p_0, \mathbf{p}) - S^<(p_0, \mathbf{p})$$

となっています。 $\rho(p_0, \mathbf{p})$ は相互作用ありでのスペクトル関数です。 $S^>(x) - S^<(x)$ を上の結果を使って計算してみると

$$\begin{aligned} S^>(x) - S^<(x) &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\cancel{\partial} + m) [(1 - n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu))e^{-ipx} - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu)e^{ipx} \\ &\quad + n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)e^{-ipx} - (1 - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu))e^{ipx}] \\ &= \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\cancel{\partial} + m) (e^{-ipx} - e^{ipx}) \end{aligned}$$

となって、化学ポテンシャルがいなくなり、ゼロ温度の場合と一致します ($e^{-ipx} - e^{ipx}$ がデルタ関数になるのは場の量子論の「伝播関数について」を見てください)。このために、相互作用なしの場合でのスペクトル関数はゼロ温度のスペクトル関数と一致しますが、 K の形式でのスペクトル関数とは一致しません。

スペクトル関数を使った先進、遅延、温度グリーン関数の表現を求めてみます。手順は通常通りです。まず $S^>(p_0)$ をスペクトル関数で表現してやると

$$\begin{aligned} S^>(p_0) &= \rho(p_0) + S^<(p_0) = \rho(p_0) - e^{\beta(-p_0 + \mu)} S^>(p_0) \\ &= \frac{\rho(p_0)}{1 + e^{\beta(-p_0 + \mu)}} \\ &= \frac{e^{\beta(p_0 - \mu)}}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1} \rho(p_0) \\ &= \left(1 - \frac{1}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1}\right) \rho(p_0) \\ &= (1 - n_F(p_0 - \mu)) \rho(p_0) \end{aligned}$$

$S^<(p_0)$ でも同様にすることで

$$\begin{aligned} S^<(p_0) &= S^>(p_0) - \rho(p_0) = -e^{\beta(p_0 - \mu)} S^<(p_0) - \rho(p_0) \\ &= \frac{-1}{e^{\beta(p_0 - \mu)} + 1} \rho(p_0) \\ &= -n_F(p_0 - \mu) \rho(p_0) \end{aligned}$$

となります。
 $S^>(t)$ は展開すると

$$\begin{aligned}
S^>(t) &= Z^{-1} \text{tr}(e^{-\beta(H-\mu N)} \psi(t) \bar{\psi}(0)) \\
&= Z^{-1} \text{tr}(e^{-\beta(H-\mu N)} e^{iHt} \psi(0) e^{-iHt} \bar{\psi}(0)) \\
&= Z^{-1} \sum_n \langle n | (e^{-\beta(H-\mu N)} e^{iHt} \psi e^{-iHt} \bar{\psi}) | n \rangle \\
&= Z^{-1} \sum_{n,m} \langle n | (e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} e^{iE_n t} \psi e^{-iE_m t} | m \rangle \langle m | \bar{\psi} | n \rangle \\
&= Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} e^{i(E_n - E_m)t} \langle n | \psi | m \rangle \langle m | \bar{\psi} | n \rangle \\
&= Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} e^{i(E_n - E_m)t} |\langle n | \psi | m \rangle|^2 \quad (|\langle n | \psi | m \rangle|^2 = \langle n | \psi | m \rangle \langle m | \bar{\psi} | n \rangle)
\end{aligned}$$

簡単のために絶対値で書いていますが、絶対値の意味にはなっていません。\$S^<(t)\$ では

$$\begin{aligned}
S^<(t) &= -Z^{-1} \text{tr}(e^{-\beta(H-\mu N)} \bar{\psi}(0) \psi(t)) \\
&= -Z^{-1} \text{tr}(e^{-\beta(H-\mu N)} \bar{\psi}(0) e^{iHt} \psi(0) e^{-iHt}) \\
&= -Z^{-1} \sum_{n,m} \langle n | e^{-\beta(H-\mu N)} \bar{\psi} e^{iHt} | m \rangle \langle m | \psi e^{-iHt} | n \rangle \\
&= -Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} e^{i(E_m - E_n)t} \langle n | \bar{\psi} | m \rangle \langle m | \psi | n \rangle \\
&= -Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_m - \mu N_m)} e^{i(E_n - E_m)t} \langle m | \bar{\psi} | n \rangle \langle n | \psi | m \rangle \\
&= -Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_m - \mu N_m)} e^{i(E_n - E_m)t} |\langle n | \psi | m \rangle|^2 \quad (|\langle n | \psi | m \rangle|^2 = \langle m | \bar{\psi} | n \rangle \langle n | \psi | m \rangle)
\end{aligned}$$

ここで気づくと思いますが、\$S^>(t), S^<(t)\$ は時間発展演算子として \$K\$ を使った場合と、

$$\exp[i(E_n - E_m)t] \Leftrightarrow \exp[i(E_n - E_m + \mu)t]$$

このように異なっています (右側が \$K\$ の形式)。これは場の関係 \$\psi'(t, \mathbf{x}) = e^{i\mu t} \psi(t, \mathbf{x})\$ に対応しています (今の場合 \$\psi(t) \bar{\psi}(0)\$ なので \$e^{i\mu t}\$ だけが出てくる)。つまり、\$H\$ の形式で遅延、先進グリーン関数を求めると \$e^{i\mu t}\$ だけずれた結果が導かれることとなります。

\$S^>(t)\$ と (8a) を使ってフーリエ変換することでスペクトル関数は

$$\begin{aligned}
\rho(p_0) &= S^>(p_0) - S^<(p_0) \\
&= (1 + e^{\beta(-p_0+\mu)})S^>(p_0) \\
&= (1 + e^{\beta(-p_0+\mu)}) \int_{-\infty}^{\infty} dt S^>(t) e^{ip_0 t} \\
&= (1 + e^{\beta(-p_0+\mu)}) \int_{-\infty}^{\infty} dt Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} e^{i(E_n - E_m)t} e^{ip_0 t} |\langle n|\psi\rangle| |\langle m\rangle|^2 \\
&= 2\pi Z^{-1} (1 + e^{\beta(-p_0+\mu)}) \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} |\langle n|\psi\rangle| |\langle m\rangle|^2 \delta(p_0 + E_n - E_m)
\end{aligned}$$

もしくは $S^>(t) - S^<(t)$ から

$$\begin{aligned}
S^>(t) - S^<(t) &= Z^{-1} \sum_{n,m} (e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} + e^{-\beta(E_m - \mu N_m)}) e^{i(E_n - E_m)t} |\langle n|\psi\rangle| |\langle m\rangle|^2 \\
&= Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} (1 + e^{\beta(E_n - E_m)} e^{\beta\mu(N_m - N_n)}) e^{i(E_n - E_m)t} |\langle n|\psi\rangle| |\langle m\rangle|^2
\end{aligned}$$

$|\langle n|\psi\rangle| |\langle m\rangle|^2$ の部分はこの場合でも $N_m = N_n + 1$ でないと 0 になってしまうので、 $N_m - N_n = 1$ より

$$\begin{aligned}
S^>(t) - S^<(t) &= Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} (1 + e^{\beta(E_n - E_m + \mu)}) e^{i(E_n - E_m)t} |\langle n|\psi\rangle| |\langle m\rangle|^2 \\
\rho(p_0) &= Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} (1 + e^{\beta(E_n - E_m + \mu)}) |\langle n|\psi\rangle| |\langle m\rangle|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(E_n - E_m)t} e^{ip_0 t} \\
&= 2\pi Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} (1 + e^{\beta(E_n - E_m + \mu)}) |\langle n|\psi\rangle| |\langle m\rangle|^2 \delta(p_0 + E_n - E_m)
\end{aligned}$$

となります。デルタ関数から $p_0 = -E_n + E_m$ となっていることを考えれば同じ結果です。4次元では $(\mathbf{k}|n\rangle = \mathbf{k}_n|n\rangle)$

$$\rho(p) = (2\pi)^4 Z^{-1} (1 + e^{\beta(-p_0+\mu)}) \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} |\langle n|\psi\rangle| |\langle m\rangle|^2 \delta(p_0 + E_n - E_m) \delta^3(\mathbf{p} + \mathbf{k}_n - \mathbf{k}_m)$$

この結果から遅延グリーン関数をスペクトル関数で表現してみます。フェルミオンなので遅延グリーン関数の定義は

$$S_R(x, y) = i\theta(x_0 - y_0) \langle \{\psi(x), \bar{\psi}(y)\} \rangle_\beta = i\theta(x_0 - y_0) (S^>(x, y) - S^<(x, y))$$

そうすると $(x_0 - y_0 = t$ として)

$$\begin{aligned}
S_R(p_0) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{ip_0 t} i\theta(t) Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} (1 + e^{\beta(E_n - E_m + \mu)}) e^{i(E_n - E_m)t} |\langle n|\psi\rangle\langle m| \rangle|^2 \\
&= iZ^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} (1 + e^{\beta(E_n - E_m + \mu)}) |\langle n|\psi\rangle\langle m| \rangle|^2 \int_0^{\infty} dt e^{i(E_n - E_m)t} e^{ip_0 t} \\
&= iZ^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} (1 + e^{\beta(E_n - E_m + \mu)}) |\langle n|\psi\rangle\langle m| \rangle|^2 \frac{1}{\epsilon - i(p_0 + E_n - E_m)} \\
&= iZ^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} (1 + e^{\beta(E_n - E_m + \mu)}) |\langle n|\psi\rangle\langle m| \rangle|^2 \frac{i}{p_0 + E_n - E_m + i\epsilon} \\
&= -Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} (1 + e^{\beta(E_n - E_m + \mu)}) |\langle n|\psi\rangle\langle m| \rangle|^2 \frac{1}{p_0 + E_n - E_m + i\epsilon}
\end{aligned}$$

というわけで、スペクトル関数によって

$$S_R(p_0) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\rho(z)}{p_0 - z + i\epsilon}$$

同様に先進では

$$S_A(p_0) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\rho(z)}{p_0 - z - i\epsilon}$$

4次元では

$$S_R(p) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\rho(z, \mathbf{p})}{p_0 - z + i\epsilon} \cdot S_A(p_0) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\rho(z, \mathbf{p})}{p_0 - z - i\epsilon} \quad (11)$$

しかし、上で求めたように相互作用のないスペクトル関数には化学ポテンシャルがないことから、このままでは少なくとも相互作用なしでの遅延、先進グリーン関数は K の形式と一致しないことが分かります。

ここまでの話から予想できるように、最低次では $S^>(p_0, \mathbf{p})$, $S^<(p_0, \mathbf{p})$ は化学ポテンシャルゼロと同じで、位置表示での最低次のスペクトル関数にも化学ポテンシャルがないことから、相互作用なしでのスペクトル関数の運動量表示は

$$\rho_0(p_0, \mathbf{p}) = 2\pi(p_0\gamma_0 - \boldsymbol{\gamma} \cdot \mathbf{p} + m)\epsilon(p_0)\delta(p^2 - m^2) \quad (12)$$

このように与えられます。 p_0 を $p_0 + \mu$ に変更すれば K の形式でのスペクトル関数になります。

スペクトル関数による温度グリーン関数の表現も同様にできます。フェルミオンの温度グリーン関数を

$$S_\beta(\tau, 0) = \langle T[\psi(\tau)\psi(0)] \rangle_\beta$$

と定義したとき、展開すると

$$S_\beta(\tau, 0) = Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} e^{(E_n - E_m)\tau} |\langle n|\psi\rangle\langle m| \rangle|^2$$

のようになります。これとスペクトル関数と遅延グリーン関数を見比べてみると、遅延グリーン関数と同じように

$$S_\beta(i\omega_n) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\rho(z, \mathbf{p})}{i\omega_n - z}$$

と書けないことがわかります。なので、 H の形式では温度グリーン関数と遅延、先進グリーン関数とが K の形式と同じ関係を持っていません。

温度グリーン関数を K の形式のものと一致させるにはフーリエ変換として (5) を使ってやればよくて、そうすると

$$\begin{aligned} S_\beta(i\omega_{n'}) &= Z^{-1} \int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_{n'} - i\mu)\tau} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} e^{(E_n - E_m)\tau} |\langle n|\psi|m\rangle|^2 \\ &= Z^{-1} \int_0^\beta d\tau \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} e^{(E_n - E_m + i\omega_{n'} + \mu)\tau} |\langle n|\psi|m\rangle|^2 \\ &= Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} \frac{e^{(E_n - E_m + i\omega_{n'} + \mu)\beta} - 1}{i\omega_{n'} + \mu + E_n - E_m} |\langle n|\psi|m\rangle|^2 \\ &= -Z^{-1} \sum_{n,m} e^{-\beta(E_n - \mu N_n)} \frac{e^{(E_n - E_m + \mu)\beta} + 1}{i\omega_{n'} + \mu + E_n - E_m} |\langle n|\psi|m\rangle|^2 \end{aligned}$$

これはスペクトル関数によって

$$S_\beta(i\omega_n, \mathbf{p}) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\rho(z, \mathbf{p})}{i\omega_n + \mu - z}$$

となり、分母に μ が現れます。分母に μ が現れることで、振動数 $i\omega_n$ に μ が加わると見なせます。この結果は「有限密度のフェルミオン」での結果と比べてみると、 $z' = z - \mu$ と変数変換すれば

$$S_\beta(i\omega_n, \mathbf{p}) = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \frac{\rho(z' + \mu, \mathbf{p})}{i\omega_n - z'}$$

となつて、 K の形式でのスペクトル関数が $z + \mu$ に依存している限り一致します。これは先進、遅延グリーン関数でも同様です。

H と K での形式の対応についてまとめておきます。まず、場に関しては

$$\psi'(t, \mathbf{x}) = e^{i\mu t} \psi(t, \mathbf{x})$$

$\psi(t, \mathbf{x})$ が H の形式、 $\psi'(t, \mathbf{x})$ が K の形式の場です。この関係から 2 つの場の間は変更されたフーリエ変換によって

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \psi'(p) e^{-i(p_0 + \mu)t + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

$$\psi'(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \psi(p) e^{-i(p_0 - \mu)t + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

このように繋がっています。また、通常の意味でのフーリエ変換を通すなら

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \psi(p) e^{-ip_0 t + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

$$\psi'(t, \mathbf{x}) = \int \frac{d^4 p}{(2\pi)^4} \psi'(p) e^{-ip_0 t + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

となっています。このフーリエ変換では2つの形式が混ざりません。通常のフーリエ変換が使えるのは、それぞれの周期的境界条件が実時間とは無関係だからです。

それぞれの場はディラック方程式と境界条件

$$(i\gamma_0 \partial_0 + i\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - m)\psi(x) = 0, \quad \psi(x) = -e^{\beta\mu} \psi(t - i\beta, \mathbf{x})$$

$$(i\gamma_0 (\partial_0 - i\mu) + i\boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - m)\psi'(x) = 0, \quad \psi'(x) = -\psi'(t - i\beta, \mathbf{x})$$

に従います。このような場を使うことで

$$S^>(x, y) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\cancel{\partial} + m) [(1 - n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)) e^{-ip(x-y)} - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu) e^{ip(x-y)}]$$

$$S^<(x, y) = - \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\cancel{\partial} + m) [n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu) e^{-ip(x-y)} - (1 - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu)) e^{ip(x-y)}]$$

$$S^{>'}(x, y) = \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\gamma_0 (\partial_0 + \mu) + \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla + m) e^{i\mu x_0} [(1 - n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu)) e^{-ip(x-y)} - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu) e^{ip(x-y)}] e^{-i\mu y_0}$$

$$S^{<'}(x, y) = - \int \frac{d^3 p}{(2\pi)^3} \frac{1}{2E_{\mathbf{p}}} (i\gamma_0 (\partial_0 + \mu) + \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla + m) e^{i\mu x_0} [n_F(E_{\mathbf{p}} - \mu) e^{-ip(x-y)} - (1 - n_F(E_{\mathbf{p}} + \mu)) e^{ip(x-y)}] e^{-i\mu y_0}$$

$$S^>(t, \mathbf{x}; y) = -e^{-\beta\mu} S^<(t + i\beta, \mathbf{x}; y), \quad S^{>'}(t, \mathbf{x}; y) = -S^{<'}(t + i\beta, \mathbf{x}; y)$$

$$(p_0 = E_{\mathbf{p}})$$

このことや $\langle \psi(x) \bar{\psi}(y) \rangle_{\beta}$ と定義されていることから

$$S^{>'}(x, y) = e^{i\mu x_0} S^>(x, y) e^{-i\mu y_0}, \quad S^{<'}(x, y) = e^{i\mu x_0} S^<(x, y) e^{-i\mu y_0}$$

そして伝播関数、遅延、先進グリーン関数も

$$S'(x, y) = e^{i\mu x_0} S(x, y) e^{-i\mu y_0}$$

という関係を持ちます。

このような対応関係は結局のところフーリエ変換の変更に押し込められています。なぜなら、フーリエ変換に2つを関連づける $e^{i\mu t}$ が入っているからです。で、このフーリエ変換の変更の原因となっているのが平面波解の違いです。Kの形式ではディラック方程式

$$(i\gamma_0 (\partial_0 - i\mu) - m)\psi'(x) = 0$$

に対して

$$\psi'(t) \simeq e^{-i(p_0 - \mu)t}$$

H の形式ではディラック方程式

$$(i\gamma_0\partial_0 - m)\psi(x) = 0 \quad (13)$$

に対して

$$\psi(t) \simeq e^{-ip_0t}$$

となっています (時間成分だけを取り出しています)。上で計算したように $\psi'(t), \psi(t)$ はそれぞれの境界条件を満たしています。このように平面波解が異なっているために (8a)、(8b)、(10) のような結果になり、平面波が異なっている場に対して同じフーリエ変換を行えば違った結果を導くという当たり前のことがおきます。特に H の形式で通常のフーリエ変換を行ってしまうと、境界条件が異なったもとの計算を行ってしまうので、 K の形式と一致した結果を導けません。通常のフーリエ変換を使うことは、 K の形式が正しいという立場 (虚時間法の結果は K の形式と一致) を取れば間違った結果であり、さらに H でのディラック方程式は (13) なので、通常のフーリエ変換では化学ポテンシャルがどこにも出てこないことからもおかしいと言うこともできます。

他にも先進や遅延グリーン関数のスペクトル関数による表現 (11) を見ることで直接理解できます。(11) に化学ポテンシャルを含まないスペクトル関数を使うと、化学ポテンシャルのない結果になります。で、これらの先進や遅延グリーン関数は方程式として通常の化学ポテンシャルのないディラック方程式を満たし、化学ポテンシャルは完全に無関係になります。つまり、化学ポテンシャルがあるときの境界条件 (??) が含まれていません。なので、結局のところ間違ったフーリエ変換 (境界条件を含んでいないフーリエ変換) を行ってしまったために、間違った結果が導かれてしまうということになります。

ついでに、 K と H での形式での伝播関数がどうなっているのかだけを書くと、 K の形式では

$$\frac{i(p'_\mu\gamma^\mu + m)}{p'^2 - m^2 + i\epsilon} - 2\pi(p'_\mu\gamma^\mu + m)[\theta(p_0 + \mu)n_F^-(E) + \theta(-p_0 - \mu)n_F^+(E)]\delta(p'^2 - m^2)$$

$$(E = \sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2})$$

という形になります。このときの p'_μ は $p'_\mu = (p_0 + \mu, p_i)$ となっています。そして、 H の形式では (通常のフーリエ変換の使用で)

$$\frac{i(p_\mu\gamma^\mu + m)}{p^2 - m^2 + i\epsilon} - 2\pi(p_\mu\gamma^\mu + m)[\theta(p_0)n_F^-(E) + \theta(-p_0)n_F^+(E)]\delta(p^2 - m^2)$$

こっちは $p_\mu = (p_0, p_i)$ となります (導出は「実時間法 ~ ディラック場 ~」を見てください)。このように階段関数と p_μ が変わって出てきます。これも時間発展演算子としてどっちを使ったのか、から来る影響です。違いが階段関数と p_0 に現れるのはこれまでの話からなんとなく予想できると思います。

上では H の形式は間違っているというような書き方をしましたが、伝播関数の形を考えれば、どちらの形式が間違っているというのではなく、単に p_0 が μ だけシフトしているというだけで、理論としての構造はどちらも正しいと言う事も出来ます。例えば、フェルミオンの自己エネルギーを H の形式で通常のフーリエ変換を行って計算していった求められた結果は、 K の形式での結果から外線運動量において μ のずれがあるだけになります。

すでに少し触れましたが、温度グリーン関数でも同様のフーリエ変換の変更によって H と K の形式をつなぐことが出来ます。虚時間でのフーリエ変換も同様に変更されるなら、通常のフーリエ変換

$$\psi(\tau, \mathbf{x}) = T \sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \psi_n(\mathbf{p}) e^{-i\omega_n\tau + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}}$$

を $\psi(\tau, \mathbf{x}) = e^{-\mu\tau} \psi'(\tau, \mathbf{x})$ から

$$\psi(\tau, \mathbf{x}) = T \sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \psi'_n(\mathbf{p}) e^{-i(\omega_n - i\mu)\tau + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \quad (14a)$$

$$\psi'(\tau, \mathbf{x}) = T \sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \psi_n(\mathbf{p}) e^{-i(\omega_n + i\mu)\tau + i\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}} \quad (14b)$$

と変更します。これによって H と K での形式と対応させることができます。例えば、温度グリーン関数として K での形

$$S'_\beta(\omega_n, E_p = \sqrt{p^2 + m^2}) = \frac{1}{-(i\omega_n + \mu)^2 + E^2}$$

を採用したときに (分子は無視します)、時間成分フーリエ変換を

$$S_\beta(\tau, E) = T \sum_n e^{-(i\omega_n + \mu)\tau} S'_\beta(p_0 = i\omega_n + \mu, E) \quad (15)$$

と行えば、(14a) から分かるように $S_\beta(\tau, E)$ は H の形式での温度グリーン関数になるので K の形式から $e^{\mu\tau}$ ずれた結果を導くこととなります。実際に、「和の計算」での化学ポテンシャルありでのフェルミオンの形を使うことで

$$\begin{aligned} S_\beta(\tau, p) &= \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} dp_0 \frac{1}{2} \left(\frac{-e^{-p_0\tau}}{p_0^2 - E^2} + \frac{-e^{p_0\tau}}{p_0^2 - E^2} \right) \\ &\quad - \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty+\mu+\epsilon}^{i\infty+\mu+\epsilon} dp_0 \frac{-e^{-p_0\tau}}{p_0^2 - E^2} \frac{1}{e^{\beta(p_0-\mu)} + 1} - \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty+\mu-\epsilon}^{i\infty+\mu-\epsilon} dp_0 \frac{-e^{-p_0\tau}}{p_0^2 - E^2} \frac{1}{e^{\beta(\mu-p_0)} + 1} \\ &= \frac{1}{2E} e^{-E\tau} + \frac{-1}{2E} \frac{e^{-E\tau}}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} + \frac{1}{-2E} \frac{e^{E\tau}}{e^{\beta(\mu+E)} + 1} \\ &= \frac{1}{2E} e^{-E\tau} - \frac{1}{2E} n_F(E-\mu) e^{-E\tau} - \frac{1}{2E} n_F(E+\mu) e^{E\tau} \\ &= \frac{1}{2E} [e^{-E\tau}(1 - n_F(E-\mu)) - e^{E\tau} n_F(E+\mu)] \end{aligned} \quad (16)$$

となって $e^{\mu\tau}$ ずれて出てきます ($\tau = it$)。これは実時間で H の形式の結果を虚時間に変更したものに对应します。「有限密度でのフェルミオン」でも言ったように、この計算過程において分布関数内が絶対値になっていないことに注意してください。 $E < \mu$ とした場合、この方法では経路 C_\pm 内に極があることになるので、経路 C_\pm の項が出てくることに気を付けてください (この項はゼロ温度項と打ち消しあうので、分布関数項だけが残りに、 $e^{-E\tau} n_F(|E-\mu|) - e^{E\tau} n_F(E+\mu)$ になる)。

ただし、虚時間法で H の形式を使用するときには、通常のフーリエ変換を使うことができないという注意点があります。これは H の形式での周期的条件が素直に β たったら元に戻る (フェルミオンでは符号が反転する) という格好をしていないためです。 β たったら元に戻るという条件のもとで虚時間法でのフーリエ展開を定義しているので、 $e^{\beta\mu}$ なんていう余計な係数がついている状況では使うことが出来ません。 H の形式で通常のフーリエ変換を行ってしまうと、全く違う結果を導いてしまいます。この場合 p_0 を $p_0 + \mu$ にすれば一致するという分かりやすいことにもなっていない、完全に違うところになってしまいます。実時間でうまくいくのは、境界条件が虚時間の周期 $i\beta$ によるものなので、 H と K の形式両方において、実時間でフーリエ変換の時間の範囲 $-\infty \sim +\infty$ に影響を与えないからです。

また、虚時間法では境界条件に $e^{\beta\mu}$ が出てきますが、これに合うようにフーリエ展開を定義すれば結局 $i\omega_n + \mu$ となって K の形式での松原振動数に一致します (「有限温度・密度でのグリーン関数まとめ」参照)。なので、虚時間法では形式の違いはないです。

2つの形式の存在による計算上での実害を最後に示します。これは2つの形式でスペクトル関数が異なっている点から出てきます。実際にそれを示していきます。そのためにフェルミオン-フェルミオンの和

$$I_{FF}(\omega_n) = T \sum_m S'(\omega_n - \omega_m, E_2) S'(\omega_m, E_1)$$

を計算します。このときの $S'(\omega_m, E_1)$ は

$$S(\omega_m, E_1) = \frac{1}{-(i\omega_m + \mu)^2 + E_1^2}$$

$$S(\omega_n - \omega_m, E_2) = \frac{1}{-(i\omega_n - (i\omega_m + \mu))^2 + E_2^2}$$

という K の形式の場合を使います。これに対して時間成分フーリエ変換として (14a) の逆変換を使えば、 H の形式での $S(\tau, E_1)$ になるので

$$\begin{aligned} I_{FF}(\omega_n) &= T \sum_m S'(\omega_m, E_1) S'(\omega_n - \omega_m, E_2) \\ &= T \sum_m \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{(i\omega_m + \mu)\tau} e^{(i\omega_n - i\omega_m - \mu)\tau'} S(\tau, E_1) S(\tau', E_2) \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} S(\tau, E_1) S(\tau, E_2) \end{aligned}$$

この $S(\tau, E_1)$ と $S(\tau, E_2)$ を運動量表示にするので、通常のフーリエ変換を使って

$$S(\tau, E_1) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} e^{-k_0 \tau} S^>(k_0, E_1), \quad S(\tau, E_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} e^{-p_0 \tau} S^>(p_0, E_2)$$

と変換します ($S'(\tau, E)$ としないために)。そして、スペクトル関数による表現は

$$S^>(k_0, E_1) = (1 - n_F(k_0 - \mu)) \rho_0(k_0, E_1)$$

$$S^>(p_0, E_2) = (1 - n_F(p_0 + \mu)) \rho_0(p_0, E_2)$$

$S^>(p)$ は H の形式なので、分布関数に μ がいてスペクトル関数にはいません。(12) の $(p_0 \gamma_0 - \gamma \cdot \mathbf{p} + m)$ がないものを ρ_0 としてしています。これを代入して

$$\begin{aligned} I_{FF}(\omega_n) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} S(\tau, E_1) S(\tau, E_2) e^{-k_0 \tau} e^{-p_0 \tau} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_n - k_0 - p_0)\tau} (1 - n_F(k_0 - \mu)) (1 - n_F(p_0 + \mu)) \rho_0(k_0, E_1) \rho_0(p_0, E_2) \end{aligned}$$

これは「有限密度でのフェルミオン」で示した結果と一致しているので、後は同じです。このように、フーリエ変換の形を変更することで、使用されるスペクトル関数が変わります。 K の形式での温度グリーン関数で書かれた和なので、何も考えずに通常のフーリエ変換を行い、 K の形式でのスペクトル関数を使えば何も問題は起きません。しかし、フーリエ変換として通常通りのものを行い、(12) を使ったら間違った結果を導いてしまいます。なので、状況を把握せずにテキトーにフーリエ変換とスペクトル関数を使うと間違ってしまうことになり (最初から一貫した形式で行って行けば間違えることはないですが)。といっても、虚時間の和の計算で H と K の形式を混ぜるなんてこと通常はしないので、よっぽどのことがない限り混乱はしないと思います。

ついでに、他の和の計算も行っておきます。分子に松原振動数がある

$$I'_{FF}(\omega_n) = T \sum_m \omega_m S'(\omega_m, E_1) S'(\omega_n - \omega_m, E_2)$$

このときは $S'(i\omega_m, E_1)$ の虚時間微分が必要ですが、フーリエ変換

$$S'(i\omega_m, \mathbf{p}) = \int_0^\beta d\tau S(\tau, \mathbf{p}) e^{i(\omega_m - i\mu)\tau}$$

から

$$\begin{aligned} \int_0^\beta d\tau \frac{dS(\tau, E_1)}{d\tau} e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} &= [S(\tau, E_1) e^{i(\omega_m - i\mu)\tau}]_0^\beta - (i\omega_m + \mu) \int_0^\beta d\tau S(\tau, E_1) e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} \\ &= S(\beta, E_1) e^{i(\omega_m - i\mu)\beta} - S(0, E_1) - (i\omega_m + \mu) \int_0^\beta d\tau S(\tau, E_1) e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} \\ &= -S(\beta, E_1) e^{\mu\beta} - S(0, E_1) - (i\omega_m + \mu) \int_0^\beta d\tau S(\tau, E_1) e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} \\ &= S(0, E_1) - S(0, E_1) - (i\omega_m + \mu) \int_0^\beta d\tau S(\tau, E_1) e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} \\ &= -(i\omega_m + \mu) \int_0^\beta d\tau S(\tau, E_1) e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} \\ &\quad (S(\tau, 0) = -e^{-\beta\mu} S(\tau - \beta, 0)) \end{aligned}$$

となっていて、通常より余計な項が現れ

$$\begin{aligned} i \int_0^\beta d\tau \frac{dS(\tau, E_1)}{d\tau} e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} &= (\omega_m - i\mu) \int_0^\beta d\tau S(\tau, E_1) e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} \\ i \int_0^\beta d\tau \frac{dS(\tau, E_1)}{d\tau} e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} + i\mu \int_0^\beta d\tau S(\tau, E_1) e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} &= \omega_m \int_0^\beta d\tau S(\tau, E_1) e^{i(\omega_m - i\mu)\tau} \end{aligned}$$

これを使えば

$$\begin{aligned} I'_{FF}(\omega_n) &= iT \sum_m \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' \frac{dS(\tau, E_1)}{d\tau} S(\tau', E_2) e^{i\omega_m\tau} e^{i(\omega_n - i\omega_m - \mu)\tau'} \\ &\quad + i\mu T \sum_m \int_0^\beta d\tau d\tau' S(\tau, E_1) S(\tau', E_2) e^{i\omega_m\tau} e^{i(\omega_n - i\omega_m - \mu)\tau'} \\ &= i \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \frac{dS(\tau, E_1)}{d\tau} S(\tau, E_2) + i\mu \int_0^\beta d\tau S(\tau, E_1) S(\tau, E_2) e^{i\omega_n\tau} \\ &= i \int_{-\infty}^\infty \frac{dk_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} \frac{d}{d\tau} (e^{-k_0\tau} S(k_0, E_1)) e^{-p_0\tau} S(p_0, E_2) \\ &\quad + i\mu \int_{-\infty}^\infty \frac{dk_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_0^\beta d\tau S(k_0, E_1) S(p_0, E_2) e^{i\omega_n\tau} e^{-k_0\tau} e^{-p_0\tau} \\ &= i \int_{-\infty}^\infty \frac{dk_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_0^\beta d\tau (-k_0 + \mu) e^{i(\omega_n - k_0 - p_0)\tau} S(k_0, E_1) S(p_0, E_2) \\ &= i \int_{-\infty}^\infty \frac{dk_0}{2\pi} \int_{-\infty}^\infty \frac{dp_0}{2\pi} \int_0^\beta d\tau (-k_0 + \mu) e^{i(\omega_n - k_0 - p_0)\tau} (1 - n_F(k_0 - \mu))(1 - n_F(p_0 + \mu)) \rho_0(k_0, E_1) \rho_0(p_0, E_2) \end{aligned}$$

次にボソン-フェルミオンでの

$$I_{FB}(\omega_n) = T \sum_m D(\omega_m, E_1) S'(\omega_n - \omega_m, E_2)$$

$$D(\omega_m, k_1) = \frac{1}{-(i\omega_m)^2 + E_1^2}$$

$$S'(\omega_n - \omega_m, E_2) = \frac{1}{-(i\omega_n + \mu - i\omega_m)^2 + E_2^2}$$

を考えます。ボソンは化学ポテンシャルと無関係なので、通常どおりです。これまでと同じようにしてやって

$$\begin{aligned} I_{FB}(\omega_n) &= T \sum_m D(\omega_m, E_1) S'(\omega_n - \omega_m, E_2) \\ &= T \sum_m \int_0^\beta d\tau \int_0^\beta d\tau' e^{i\omega_m \tau} e^{(i\omega_n - i\omega_m + \mu)\tau'} D^>(\tau, E_1) S^>(\tau', E_2) \\ &= \int_0^\beta d\tau e^{(i\omega_n + \mu)\tau} D^>(\tau, E_1) S^>(\tau, E_2) \end{aligned}$$

$$D^>(\tau, E_1) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} e^{-k_0 \tau} S^>(k_0, E_1), \quad S^>(\tau, E_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} e^{-p_0 \tau} S^>(p_0, E_2)$$

と変換します。そして、スペクトル関数による表現は

$$D^>(k_0, E_1) = (1 + n_B(k_0)) \rho_B(k_0, E_1)$$

$$S^>(p_0, E_2) = (1 - n_F(p_0 - \mu)) \rho_F(p_0, E_2)$$

ρ_B はボソン、 ρ_F はフェルミオンの相互作用なしスペクトル関数 ρ_0 と同じです。これらを入れて

$$\begin{aligned} I_{FB}(\omega_n) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_0^\beta d\tau e^{(i\omega_n + \mu)\tau} D^>(\tau, E_1) S^>(\tau, E_2) e^{-k_0 \tau} e^{-p_0 \tau} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dp_0}{2\pi} \int_0^\beta d\tau e^{(i\omega_n + \mu - k_0 - p_0)\tau} (1 + n_B(k_0))(1 - n_F(p_0 - \mu)) \rho_B(k_0, E_1) \rho_F(p_0, E_2) \end{aligned}$$

これも一致した結果になります。