虚時間法

統計力学に場の理論の考えを組み込んでみます。といっても、ここでの話は通常の統計力学でも同様に成り立っている話です。
単位系として、これ以降自然単位系を使うことにします。この場合、光速 c、プランク定数 $\hbar$ だけでなくボルツマン定数 k_B も 1 とします。そうすると、温度 T は質量の単位を持ちます。そして、これ以降無断で β という記号を使った場合は $\beta = 1/T$ を指すことにします (β は長さの単位)。
虚時間法には演算子形式によるものと経路積分によるものの二つがありますが、まずは演算子形式を扱い、特徴的な性質を導いていきます (具体的な計算は経路積分を使った方が分かりやすいので、そっちで行います)。
場の理論において大事なものは 2 点相関関数 (伝播関数) であり、それによって摂動計算を行い多様な結果を導いています。これを踏まえれば、統計力学的な 2 点相関関数がどのようにして求められ、どんな格好をしているのかが大事な点であることが分かります。というわけで、2 点相関関数を求めていくことにします。また、その導出は、ほとんどゼロ温度での場の理論と平行したものになっていることに注意していってください。

最初に統計力学の復習から始めていきます。量子力学では、ある状態 $|n>$ における観測量 A の平均値は波動関数を使って

$$\overline{A}_n =<\psi_n|A|\psi_n>= \int dx \psi_n^*(x)\hat{A}(x)\psi_n(x) \tag{1}$$

という形でかけます (位置 x で観測量 A を見つける期待値)。
統計力学では多数の状態がある場合を考慮するので、多数の状態の実現確率で平均値をとる (熱的平均と呼ぶことにします) ということから、分配関数を使えば、各状態で観測される量 A_i による熱的平均 $\langle A\rangle_\beta$ は

$$\langle A\rangle_\beta = \sum_i A_i P_i = \frac{\sum_i A_i \exp[-\beta E_i]}{Z}$$

そして、ここでの観測される量 A_i というのは量子力学からすれば (1) によって求められるものなので

$$\langle A\rangle_\beta = \sum_i \overline{A}_i P_i = \sum_i \frac{\int dx\ \psi^\dagger(x)\hat{A}(x)\psi(x)\exp[-\beta E_i]}{Z}$$

$\hat{A}(x)$ は $\psi(x)$ に作用するということと、密度行列を

$$\rho(x) = \sum_i \exp[-\beta E_i]\psi_i(x)\psi_i^*(x)$$

と定義することで

$$\langle A\rangle_\beta = \int dx\ \hat{A}(x)\rho(x) = \mathrm{tr}(\rho A)$$

また、離散的な場合として密度行列の定義に

$$\rho = \sum_n |\phi_n > P_n < \phi_n|$$

を使った場合を示せば

$$
\begin{aligned}
\langle A\rangle_\beta = \sum_n P_n \overline{A}_n &= \sum_n P_n < \phi_n|A|\phi_n > \\
&= \sum_n \sum_i P_n < \phi_n|A|i >< i|\phi_n > \\
&= \sum_n \sum_i < i|\phi_n > P_n < \phi_n|A|i > \\
&= \sum_i < i|\rho A|i > \\
&= \mathrm{tr}(\rho A)
\end{aligned}
$$

となって同じになります。規格化すれば演算子に対する熱的平均は

$$
\langle A\rangle_\beta = \frac{\mathrm{tr}(\rho A)}{\mathrm{tr}\rho}
$$

これは、二つの演算子 A, B の場合に対しても

$$
\langle AB\rangle_\beta = \frac{\mathrm{tr}(\rho AB)}{\mathrm{tr}\rho}
$$

と書くことができます。また、分配関数がトレースを使うことで、ハミルトニアン演算子によって

$$
Z = \mathrm{tr}\rho = \mathrm{tr}e^{-\beta H}
$$

このように表現できるということが次への発想に繋がります。場の理論では粒子数の変化が必要になるので、分配関数と言っていきますが大分配関数のことです。ここでは化学ポテンシャルはハミルトニアンの中に入っているために表に出てきませんが、あってもなくても成立している話です (「有限密度でのフェルミオン」参照)。

　ここからが本題です。熱的平均に対して時間依存性を持たせるためにハイゼンベルグ描像で表現していきます。演算子 A をハイゼンベルグ描像とした時の $A_H(t)$ に対する熱的平均は

$$
\langle A_H(t)\rangle_\beta = Z^{-1}\mathrm{tr}(\rho A_H(t))
$$

ここから特徴的な変形を行います

$$
\begin{aligned}
\langle A_H(t)\rangle_\beta = Z^{-1}\mathrm{tr}(\rho A_H(t)) &= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}A_H(t)) \\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}A_H(t)e^{\beta H}e^{-\beta H}) \\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{i(iH\beta)}A_H(t)e^{-i(iH\beta)}e^{-\beta H}) \\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(A_H(t+i\beta)e^{-\beta H}) \\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}A_H(t+i\beta)) \\
&= \langle A_H(t+i\beta)\rangle_\beta
\end{aligned}
$$

途中で演算子のハイゼンベルグ描像における時間発展の関係

$$A_H(t) = e^{iHt}A(t=0)e^{-iHt}$$

において時間 t を β だと思って使い、最後でトレースの巡回性を使っています。このことから、演算子の熱的平均に周期性があることが分かります。これは演算子の数を増やしても成り立っており、例えば 2 つでは

$$\begin{aligned}
\langle A_H(t)B_H(t')\rangle_\beta &= Z^{-1}\mathrm{tr}(\rho A_H(t)B_H(t')) \\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}A_H(t)B_H(t')) \\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}A_H(t)e^{\beta H}e^{-\beta H}B_H(t')) \\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{i(iH\beta)}A_H(t)e^{-i(iH\beta)}e^{-\beta H}B_H(t')) \\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(A_H(t+i\beta)e^{-\beta H}B_H(t')) \\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}B_H(t')A_H(t+i\beta)) \\
&= \langle B_H(t')A_H(t+i\beta)\rangle_\beta
\end{aligned}$$

このような関係を演算子の熱的平均が持つことから、熱的な観測量は周期 $i\beta$ を持つということを示しており、久保-Martin-Schwinger の関係と呼ばれています。久保-Martin-Schwinger の関係は有限温度での重要な性質です。そして、虚数のかかった $i\beta$ を時間だと考えているのが有限温度での特徴的な発想です。

次に相互作用を加えて、相互作用描像に持っていき時間発展演算子の類似的な話に行きます。相互作用ありのハミルトニアンとして

$$H = H_0 + H_{int}$$

というのを定義します。そうすると密度行列は相互作用なしの密度行列を ρ_0 として

$$\rho = e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0}e^{\beta H_0}e^{-\beta H} = \rho_0 e^{\beta H_0}e^{-\beta H} = \rho_0 U(\beta)$$

$$U(\beta) = e^{\beta H_0}e^{-\beta H} = e^{\beta H_0}e^{-\beta(H_0+H_{int})} = e^{-\beta H_{int}}$$

ここでの $U(\beta)$ は場の量子論の「相互作用描像と時間発展演算子」で出てきた時間発展演算子 U と似た形をしているのが分かります。違いは exp の肩に i がいないということと時間 t でなく温度の逆数 β になっているという点です。変数を $\tau(0 \leq \tau \leq \beta)$ として τ による $U(\tau)$ の微分方程式を作ると、場の量子論で出てきたことと全く同じようにして

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U(\tau)}{\partial \tau} &= \frac{\partial e^{H_0\tau}}{\partial \tau}e^{-H\tau} + e^{H_0\tau}\frac{\partial e^{-H\tau}}{\partial \tau} \\
&= H_0 e^{H_0\tau}e^{-H\tau} - e^{H_0\tau}He^{-H\tau} \\
&= \rho_0^{-1}(\tau)H_0\rho(\tau) - \rho_0^{-1}(\tau)H\rho(\tau) \qquad (\rho_0^{-1} = e^{H_0\tau}) \\
&= \rho_0^{-1}(\tau)(H_0 - H)\rho(\tau) \\
&= \rho_0^{-1}(\tau)(H_0 - H)\rho_0(\tau)\rho_0^{-1}(\tau)\rho(\tau) \\
&= -\rho_0^{-1}(\tau)H_{int}\rho_0(\tau)\rho_0^{-1}(\tau)\rho(\tau) \\
&= -H_I\rho(\tau)
\end{aligned}$$

$$H_I = \rho_0^{-1}(\tau) H_{int} \rho_0(\tau) \tag{2}$$

このようにして相互作用描像での表現を得ることが出来ます。ここまで来るとなんとなく分かってくるように、ゼロ温度の場の量子論での時間 t を虚時間 it にもっていたものと関係していることがわかります。そして、これが虚時間法 (imaginary time formalism) と呼ばれる理由です (注意としては、τ は実数だということです)。

そして、ゼロ温度での場の量子論と同じことを繰り返すことで、積分による $U(\beta)$ の表現

$$U(\beta) = T\left(\exp\left[-\int_0^\beta d\tau H_I(\tau)\right]\right)$$

が求まります。ただし、今見てきた U に対して

$$U(\tau_1,\tau_2)U(\tau_2,\tau_3) = U(\tau_1,\tau_3) \quad (\tau_1 > \tau_2 > \tau_3)$$

を満たしているとします。また、表記として

$$U(\tau,0) = U(\tau)\ ,\ U^{-1}(\tau) = U(0,\tau)$$

このように書くことにします。

これで準備ができたので 2 点相関関数を見ていきます。ゼロ温度の場の理論で重要だったのは場の演算子を真空で挟むことで作られた 2 点相関関数 (伝播関数) でした。ここでも同じように場の演算子を使って作ります。ただし、今の場合では真空で挟むという発想ではなく、場の演算子の熱的平均を 2 点相関関数として用いることにします。この虚時間を使った 2 点相関関数を温度グリーン関数や松原グリーン関数と呼んだりします。

簡単のために、時間成分だけで見ていきます (三次元成分はゼロ温度の場合から変更されない)。ゼロ温度の場の量子論において重要な役割を持っている 2 点相関関数 (伝播関数) は

$$G(t,t') = <\Omega|T(\phi_H(t)\phi_H^\dagger(t'))|\Omega>$$

として求められます (ϕ_H はハイゼンベルグ描像での場、Ω は相互作用ありでの真空)。これと同じようにして場の熱的平均としての 2 点相関関数は

$$G_\beta(\tau,\tau') = \langle T(\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau'))\rangle_\beta$$

とします (ここでの T は実時間でなく τ の大小に関してです。温度はほとんど β を使っているので混乱はしないと思います)。この 2 点相関関数は 1 粒子 2 点相関関数の熱的平均 (統計平均とか集団平均といったほうがイメージしやすいかもしれません) を表しているということには注意してください (場の演算子 ϕ は 1 粒子の生成や消滅に関係する演算子)。ハイゼンベルグ描像と言っても今の場合では

$$\phi_H(\tau) = e^{H\tau}\phi e^{-H\tau}\ ,\ \phi_H^\dagger(\tau) = e^{H\tau}\phi^\dagger e^{-H\tau}$$

となっており、τ は上で使った β に対応するもので、$it = \tau$ です (エルミート共役の符号に注意)。ハイゼンベルグ描像と相互作用描像の関係は (2) より

$$
\begin{aligned}
A_H(\tau) &= e^{H\tau}Ae^{-H\tau} \\
&= e^{H\tau}e^{-H_0\tau}A_I(\tau)e^{H_0\tau}e^{-H\tau} \\
&= U^{-1}(\tau)A_I(\tau)U(\tau)
\end{aligned}
$$

この関係と、時間順序積の定義 (今の場合は τ の大小に関して)

$$
T(\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau')) = \theta(\tau-\tau')\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau') \pm \theta(\tau'-\tau)\phi_H^\dagger(\tau')\phi_H(\tau)
$$

(ゼロ温度の場の量子論と同じようにボソンなら $+$、フェルミオンなら $-$ という 性質は同じです) から、熱的平均での 2 点相関関数は (τ, τ' の範囲はともに 0 から β まで)

$$
\begin{aligned}
G_\beta(\tau,\tau') = \langle T(\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau'))\rangle_\beta &= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}T(\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau'))) \\
&= \frac{\mathrm{tr}[e^{-\beta H}T(\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau'))]}{\mathrm{tr}e^{-\beta H}} \\
&= \frac{\mathrm{tr}[e^{-\beta H}T(U^{-1}(\tau)\phi_I(\tau)U(\tau)U^{-1}(\tau')\phi_I^\dagger(\tau')U(\tau'))]}{\mathrm{tr}e^{-\beta H}} \\
&= \frac{\mathrm{tr}[e^{-\beta H_0}U(\beta)T(U^{-1}(\tau)\phi_I(\tau)U(\tau)U^{-1}(\tau')\phi_I^\dagger(\tau')U(\tau'))]}{\mathrm{tr}(e^{-\beta H_0}U(\beta))} \qquad (U(\beta)=e^{\beta H_0}e^{-\beta H}) \\
&= \frac{\mathrm{tr}[e^{-\beta H_0}T(U(\beta)U^{-1}(\tau)\phi_I(\tau)U(\tau)U^{-1}(\tau')\phi_I^\dagger(\tau')U(\tau'))]}{\mathrm{tr}(e^{-\beta H_0}U(\beta))} \\
&= \frac{\mathrm{tr}[e^{-\beta H_0}T(U(\beta,0)U(0,\tau)\phi_I(\tau)U(\tau,0)U(0,\tau')\phi_I^\dagger(\tau')U(\tau',0))]}{\mathrm{tr}(e^{-\beta H_0}U(\beta))} \\
&= \frac{\mathrm{tr}[e^{-\beta H_0}T(\phi_I(\tau)\phi_I^\dagger(\tau')U(\beta))]}{\mathrm{tr}(e^{-\beta H_0}U(\beta))} \\
&= \frac{\langle T(\phi_I(\tau)\phi_I^\dagger(\tau')U(\beta))\rangle_\beta}{\langle U(\beta)\rangle_\beta}
\end{aligned}
$$

途中で $U(\beta)$ を時間順序積の中に入れられるのは、β が τ, τ' よりも大きいからです。また、U は時間順序積の中では ϕ_I と入れ替えられるので、$U(\beta)$ へ変形させられます。最後の熱平均にするときに、ハミルトニアンは H_0 なので、これは相互作用なしでの相互作用表示の演算子に対する熱的平均です。式の構成はゼロ温度の場の量子論での Gell-Mann-Low の定理と同じです。このように、ほとんどゼロ温度での話と同じになっていることからも予想できるように、このままウィックの定理や摂動論へと進めることが出来ます。

　2 点相関関数をさらに見ていきます。τ, τ' に対する時間順序によって

$$
\begin{aligned}
G_\beta(\tau,\tau') = \langle T(\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau'))\rangle_\beta &= \theta(\tau-\tau')\langle\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau')\rangle_\beta \pm \theta(\tau'-\tau)\langle\phi_H^\dagger(\tau')\phi_H(\tau)\rangle_\beta \\
&= \theta(\tau-\tau')G_\beta^+(\tau,\tau') + \theta(\tau'-\tau)G_\beta^-(\tau',\tau)
\end{aligned}
$$

$$
G_\beta^+(\tau,\tau') = \langle\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\tau')\rangle_\beta
$$

$$
G_\beta^-(\tau,\tau') = \pm\langle\phi_H^\dagger(\tau')\phi_H(\tau)\rangle_\beta
$$

このように定義するものを考えます (G_β^- のプラスがボソン、マイナスがフェルミオンの場合)。この虚時間 τ に対する時間順序のグリーン関数を温度グリーン関数もしくは松原グリーン関数と呼びます。そうすると ($0 \le \tau' \le \beta$)

$$
\begin{aligned}
G_\beta(0,\tau') = G_\beta^-(0,\tau') &= \langle T(\phi_H(0)\phi_H^\dagger(\tau'))\rangle_\beta \\
&= Z^{-1}(\beta)\mathrm{tr}(e^{-\beta H}(\theta(0-\tau')\phi_H(0)\phi_H^\dagger(\tau') \pm \theta(\tau'-0)\phi_H^\dagger(\tau')\phi_H(0)) \\
&= Z^{-1}(\beta)\mathrm{tr}(\pm e^{-\beta H}\phi_H^\dagger(\tau')\phi_H(0)) \\
&= Z^{-1}(\beta)\mathrm{tr}(\pm \phi_H(0)e^{-\beta H}\phi_H^\dagger(\tau')) \\
&= Z^{-1}(\beta)\mathrm{tr}(\pm e^{-\beta H}e^{\beta H}\phi_H(0)e^{-\beta H}\phi_H^\dagger(\tau')) \\
&= Z^{-1}(\beta)\mathrm{tr}(\pm e^{-\beta H}\phi_H(\beta)\phi_H^\dagger(\tau')) \\
&= \pm\langle \phi_H(\beta)\phi_H^\dagger(\tau')\rangle_\beta \\
&= \langle T(\phi_H(\beta)\phi_H^\dagger(\tau'))\rangle_\beta \\
&= \pm G_\beta^+(\beta,\tau') \\
&= \pm G_\beta(\beta,\tau')
\end{aligned}
$$

また、これの逆の $G_\beta(\tau,0)$ では ($0 \le \tau \le \beta$)

$$
\begin{aligned}
G_\beta(\tau,0) = G_\beta^+(\tau,0) &= \langle T(\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(0))\rangle_\beta \\
&= Z^{-1}(\beta)\mathrm{tr}(e^{-\beta H}(\theta(\tau-0)\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(0) \pm \theta(0-\tau)\phi_H^\dagger(0)\phi_H(\tau)) \\
&= Z^{-1}(\beta)\mathrm{tr}(e^{-\beta H}\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(0)) \\
&= Z^{-1}(\beta)\mathrm{tr}(\phi_H^\dagger(0)e^{-\beta H}\phi_H(\tau)) \\
&= Z^{-1}(\beta)\mathrm{tr}(e^{-\beta H}e^{\beta H}\phi_H^\dagger(0)e^{-\beta H}\phi_H(\tau)) \\
&= Z^{-1}(\beta)\mathrm{tr}(e^{-\beta H}\phi_H^\dagger(\beta)\phi_H(\tau)) \\
&= \langle \phi_H^\dagger(\beta)\phi_H(\tau)\rangle_\beta \\
&= \langle T(\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\beta))\rangle_\beta \\
&= \pm G_\beta^-(\tau,\beta) \\
&= \pm G_\beta(\tau,\beta)
\end{aligned}
$$

2 点相関関数はこのように時間順序に関して β による (反) 周期性を持つことになります (久保-Martin-Schwinger の関係)。そして

$$
\langle T(\phi_H(0)\phi_H^\dagger(\tau'))\rangle_\beta = \langle T(\phi_H(\beta)\phi_H^\dagger(\tau'))\rangle_\beta \quad (-\beta \le \tau \le 0)
$$

$$
\langle T(\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(0))\rangle_\beta = \langle T(\phi_H(\tau)\phi_H^\dagger(\beta))\rangle_\beta \quad (0 \le \tau \le \beta)
$$

となっているので、c 数の場 (場の演算子の固有値) に対しても

$$
\phi_H(0) = \phi_H(\beta) \quad (\text{ボソン})
$$

$$\phi_H(0)=-\phi_H(\beta)\quad(\text{フェルミオン})$$

このような周期性と反周期性を持たせます。フェルミオンでマイナスがつくのは $G(\tau,0)=-G(\tau,\beta)$ だからです。
　また、$G^+(\tau)$ を

$$\begin{aligned}
G^+(\tau)=Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}\phi_H(\tau)\phi_H(0)) &= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}e^{H\tau}\phi_H(0)e^{-H\tau}\phi_H(0))\\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-H(\beta-\tau)}\phi_H(0)e^{-H\tau}\phi_H(0))\\
&= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-H(\beta-\tau)}\phi e^{-H\tau}\phi)
\end{aligned}$$

このように変形して、ハミルトニアンの固有状態を挟んでいくことで

$$\begin{aligned}
Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-H(\beta-\tau)}\phi e^{-H\tau}\phi) &= Z^{-1}\sum_n <n|(e^{-\beta H}e^{H\tau}\phi e^{-H\tau}\phi)|n>\\
&= Z^{-1}\sum_{n,m}<n|(e^{-\beta H}e^{H\tau}\phi e^{-H\tau}|m><m|\phi|n>\\
&= Z^{-1}\sum_{n,m}<n|(e^{-\beta E_n}e^{E_n\tau}\phi e^{-E_m\tau}|m><m|\phi|n>\\
&= Z^{-1}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}e^{(E_n-E_m)\tau}<n|\phi|m><m|\phi|n>\\
&= Z^{-1}\sum_{n,m}e^{-\beta E_n}e^{(E_n-E_m)\tau}|<n|\phi|m>|^2
\end{aligned}$$

となっています。このとき τ が $0\sim\beta$ の間にいないと和が発散してしまう可能性があります。同様に $G^-(\tau)$ では $-\beta\sim 0$ の制限がかかります。なので、$G_\beta(\tau)$ は $-\beta\leq\tau\leq\beta$ の範囲に存在しています。しかし、$G^\pm(\tau)$ の制限から温度グリーン関数として $G_\beta(\tau)$ を $0\leq\tau\leq\beta$ の範囲で考えるときには、$G^+(\tau,0)$ だけを見ればいいことも分かります (階段関数の性質から言えば当たり前ですが)。これは $G^+(\tau,0)$ だけをフーリエ変換することで運動量表示が求められることで実際に確かめられます (「有限温度でのグリーン関数」参照)。
　2 点相関関数が $\tau'-\tau(-\beta\leq\tau'-\tau\leq\beta)$ にしか依存していないとすれば、$G_\beta(\tau,0)=G_\beta(\tau)$ に対して $(0\leq\tau\leq\beta)$

$$G_\beta(\tau)=G_\beta(\tau-\beta)$$

と書くことができます。また、$G_\beta(0,\tau)=G_\beta(\tau)$ では $(-\beta\leq\tau\leq 0)$

$$G_\beta(\tau)=G_\beta(\tau+\beta)$$

これらはボソンの場合で、フェルミオンならマイナスがつきます。
　このように 2 点相関関数が $\pm\beta$ の範囲で周期的 (もしくは反周期的) になっているために、$G_\beta(\tau)$ はボソン、フェルミオンに対して周期 2β を持ちます。なので、フーリエ級数展開で

$$G_\beta(\tau)=\frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty}e^{-i\omega_n\tau}G_\beta(\omega_n)$$

と書くことが出来ます。そして、これの逆変換は離散的に取る必要はないので積分範囲を $-\beta\leq\tau\leq\beta$ として

$$G_\beta(\omega_n)=\frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta}d\tau G_\beta(\tau)e^{i\omega_n\tau}$$

これはフーリエ級数の定義に当てはめただけです ($\omega_n=n\pi/\beta$)。ここで特徴的なのは ω_n が離散的な振動数であるということです。整数 n はあらゆる整数が取れますが、ボソンとフェルミオンに対して同じように取れるのかということが問題になってきます。それを見るために式変形を行って、周期性、反周期性の性質を入れます。積分を変形させていくと

$$\begin{aligned}
G_\beta(\omega_n) &= \frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta}d\tau G_\beta(\tau)e^{i\omega_n\tau}\\
&= \frac{1}{2}\int_{-\beta}^{0}d\tau G_\beta(\tau)e^{i\omega_n\tau}+\frac{1}{2}\int_{0}^{\beta}d\tau G_\beta(\tau)e^{i\omega_n\tau}\\
&= \pm\frac{1}{2}\int_{-\beta}^{0}d\tau G_\beta(\tau+\beta)e^{i\omega_n\tau}+\frac{1}{2}\int_{0}^{\beta}d\tau G_\beta(\tau)e^{i\omega_n\tau}\\
&= \pm\frac{1}{2}\int_{0}^{\beta}d\tau' e^{i\omega_n(\tau'-\beta)}G_\beta(\tau')+\frac{1}{2}\int_{0}^{\beta}d\tau e^{i\omega_n\tau}G_\beta(\tau)\qquad(\tau'=\tau+\beta)\\
&= \frac{1}{2}\int_{0}^{\beta}d\tau e^{i\omega_n\tau}G_\beta(\tau)(1\pm e^{-i\omega_n\beta})\\
&= \frac{1}{2}(1\pm e^{-in\pi})\int_{0}^{\beta}d\tau e^{i\omega_n\tau}G_\beta(\tau)\\
&= \frac{1}{2}(1\pm(\cos n\pi-i\sin n\pi))\int_{0}^{\beta}d\tau e^{i\omega_n\tau}G_\beta(\tau)\\
&= \frac{1}{2}(1\pm(-1)^n)\int_{0}^{\beta}d\tau e^{i\omega_n\tau}G_\beta(\tau)
\end{aligned}\tag{3}$$

3 行目の第一項で出てくる $\pm$ がボソン、フェルミオンに対する周期性で、最後の行への変形は π の整数倍では $\sin$ は 0 であることと、n が偶数なら $\cos$ は $+1$、奇数なら -1 となる性質を使っています。なので、ボソンなら n が奇数のとき

$$G_\beta(\omega_n)=\frac{1}{2}(1+(-1))\int_{0}^{\beta}d\tau e^{i\omega_n\tau}G_\beta(\tau)=0$$

となり消えてしまい、フェルミオンでは逆に n が偶数のとき消えます。というわけで振動数 ω_n は

$$\omega_n=\begin{cases}\frac{2n\pi}{\beta} & \text{ボソン}\\ \frac{(2n+1)\pi}{\beta} & \text{フェルミオン}\end{cases}\qquad(n=0,\pm1,\pm2,\cdots)$$

また、(3) から

$$G_\beta(\omega_n)=\frac{1}{2}\int_{-\beta}^{\beta}d\tau G_\beta(\tau)e^{i\omega_n\tau}=\int_{0}^{\beta}d\tau G_\beta(\tau)e^{i\omega_n\tau}$$

というようになります。このように時間成分が離散的になることが有限温度に拡張したときの特徴で、ω_n のことを松原振動数と呼んでいます。そして、今までは時間成分しか見ませんでしたが、空間成分に関してはゼロ温度から何も変更されずに入ってきます。なので、4 次元でのフーリエ変換は

$$G_\beta(\tau,\boldsymbol{x})=\frac{1}{\beta}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\int\frac{d^3p}{(2\pi)^3}e^{-i(\omega_n\tau-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x})}G_\beta(\omega_n,\boldsymbol{p})$$

$$G_\beta(\omega_n,\boldsymbol{p})=\int_0^\beta d\tau\int d^3xe^{i(\omega_n\tau-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{x})}G_\beta(\tau,\boldsymbol{x})$$

場に対するフーリエ変換もこれと同じになってます。また、場の理論ではよくデルタ関数が出てきますが、時間成分をクロネッカーデルタに変える必要が出てきます。つまり

$$\int_0^\beta d\tau e^{i(\omega_{n'}-\omega_n)\tau}=\beta\delta_{nn'}$$

このように変更されます (左辺の積分は $n=n'$ のときに β になって、他の場合では 0 になっている)。

温度グリーン関数 $G_\beta(\tau,\boldsymbol{x})$ は虚時間でのファインマンの伝播関数に対応させるように作られているという点には注意してください。実時間を含めた形式で同じように有限温度でのファインマンの伝播関数を作ることができますが、全く異なった構造をしています (「実時間の伝播関数」や「実時間法」参照)。虚時間と実時間での差には注意が必要です。そして混乱に拍車をかけるように、遅延グリーン関数、先進グリーン関数 (これらは当然実時間) も出てくるために、何を計算しているのか混乱する可能性があります。また、温度グリーン関数は遅延、先進グリーン関数と密接に関係しているという点にも注意が必要です (「有限温度でのグリーン関数」参照)。

ここでもう 1 つの表現の仕方にも触れておきます。簡単に言えば、ここまでは $0\leq\tau\leq\beta$ のように τ を使ってきましたが、これを t に戻します。ただしこの t は通常の実時間でなく、複素平面上を動くと考えます。つまり、複素平面上で t の経路を作ることになります ($t=t_0-i\tau$, $0\leq\tau\leq\beta$, t_0 : 適当な始点)。このときの制限は $0\leq it\leq\beta$ なので、t は周期として $[0,-i\beta]$ を持つことになります。これによって、時間成分のフーリエ変換が

$$G_\beta(\omega_n)=\int_0^{-i\beta}dtG_\beta(t)e^{i\omega'_nt}$$

$$G_\beta(t)=\frac{1}{-i\beta}\sum_n e^{-i\omega'_nt}G_\beta(\omega'_n)$$

このように変更されます。松原振動数も周期が $-i\beta$ になっていることから

$$\omega'_n=\frac{2\pi n}{-i\beta}$$

そして、デルタ関数は

$$\int_0^{-i\beta}dte^{i(\omega'_{n'}-\omega'_n)t}=-i\beta\delta_{nn'}$$

となります。最初に見てきたような虚時間に一気に接続してしまう方法より、このように、複素平面上で扱った方が見通しがいいかもしれません。その理由は、ここからなら伝播関数をゼロ温度でのファインマン則そのままの形で与えることが出来るからです。つまり、有限温度の伝播関数はゼロ温度の伝播関数の p_0 を ω'_n に変えるだけで求まります。さらに重要な点は、複素数としてですが、時間 t が含まれた形式になっているところです。このことによって、実時間を変数に持つ 2 点相関関数を組み立てることが出来るので、それを簡単に眺めておきます。

通常の実時間に対する時間順序での 2 点相関関数 (ファインマンの伝播関数) は

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

これ以降はボソンの実数場を扱いますが複素場やフェルミオンでも同様です。ここでの θ は実時間に対する大小関係に対してで、時間順序に合わせて

$$G^>(x,y)=Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}\phi_H(x)\phi_H(y))$$

$$G^<(x,y)=Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}\phi_H(y)\phi_H(x))=G^>(y,x)$$

という記号を定義します (場の量子論の「伝播関数について」での $\Delta^{(\pm)}(x,y)$ に対応)。$>$ の向きは、例えば $G^>(x,y)$ の y より x の方が大きいということに対応してつけています (上での $\pm$ と同じ意味なんですが、この記号を使っている場合が多いので使うことにします)。

　複素数の時間 t に対して制限があることを見ます。簡単のために、$G^>(t,0)=G^>(t)$ について考えて

$$\begin{aligned}G^>(t)=Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}\phi_H(t)\phi_H(0)) &= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-\beta H}e^{iHt}\phi_H(0)e^{-iHt}\phi_H(0))\\ &= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-H(\beta-it)}\phi_H(0)e^{-iHt}\phi_H(0))\\ &= Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-H(\beta-it)}\phi e^{-iHt}\phi)\end{aligned}$$

ハミルトニアンの固有状態を挟んで

$$\begin{aligned}Z^{-1}\mathrm{tr}(e^{-H(\beta-it)}\phi e^{-iHt}\phi) &= Z^{-1}\sum_n <n|(e^{-\beta H}e^{iHt}\phi e^{-iHt}\phi)|n>\\ &= Z^{-1}\sum_{n,m} <n|(e^{-\beta H}e^{iHt}\phi e^{-iHt}|m><m|\phi|n>\\ &= Z^{-1}\sum_{n,m} <n|(e^{-\beta E_n}e^{iE_nt}\phi e^{-iE_mt}|m><m|\phi|n>\\ &= Z^{-1}\sum_{n,m} e^{-\beta E_n}e^{i(E_n-E_m)t}<n|\phi|m><m|\phi|n>\\ &= Z^{-1}\sum_{n,m} e^{-\beta E_n}e^{i(E_n-E_m)t}|<n|\phi|m>|^2 \end{aligned}\tag{4}$$

となります。この結果は「有限温度でのグリーン関数」でも使います。この (4) を見てみると、

$$e^{-\beta E_n}e^{i(E_n-E_m)t}=e^{-iE_mt}e^{iE_n(t+i\beta)}$$

となっているので、和が収束するためには、t が複素数なら、$D^>(t)$ において t の虚部には

$$-\beta\leq \mathrm{Im}t\leq 0$$

という制限があることになります。$D^>(t,t')$ として $t-t'$ でも同様に考えていくことで

$$-\beta \leq \mathrm{Im}(t-t') \leq 0$$

となります。この範囲内に $D^{>}(t,t')$ は存在します。また、逆向きの $G^{<}(t,t')$ なら

$$0 \leq \mathrm{Im}(t-t') \leq \beta$$

となっています。合わせれば、$G(t,t')$ は $-\beta \leq \mathrm{Im}(t-t') \leq \beta$ という範囲を持つことが分かり、温度グリーン関数での制限と同じです。

t を使った場合での久保-Martin-Schwinger の関係は、τ を使った場合からの変更点だけをみればいいので、同じようにして $G^{>}(t,0)$ に対しては (t の実部、つまり実時間に対する大小関係から)、最初の方で同じことをやっていますが

$$\begin{aligned}
G^{>}(t,0) &= \mathrm{tr}(e^{-\beta H}\phi_H(t)\phi_H(0)) \\
&= \mathrm{tr}(\phi_H(0)e^{-\beta H}\phi_H(t)) \\
&= \mathrm{tr}(\phi_H(0)e^{-\beta H}\phi_H(t)e^{\beta H}e^{-\beta H}) \\
&= \mathrm{tr}(\phi_H(0)\phi_H(t+i\beta)e^{-\beta H}) \\
&= G^{<}(t+i\beta,0)
\end{aligned}$$

規格化の Z^{-1} は無視して書いています。途中で時間 t を β だと思ったハイゼンベルグ表示の関係

$$e^{-\beta H}\phi_H(t)e^{\beta H} = \phi_H(t+i\beta) \quad (e^{iHt}\phi_H(0)e^{-iHt} = \phi_H(t))$$

を使っています。よって $G^{>}(t,t')$ では

$$G^{>}(t,t') = G^{<}(t+i\beta,t')$$

このようにして、実時間の順序を組み込んだ定式化も同様に行うことができます。そして、虚時間に接続したものが対応するので、$-\beta \leq \mathrm{Im}t \leq 0$ を踏まえることで $G^{>}(t)$ と温度グリーン関数は

$$G_\beta(\tau) = G^{+}_\beta(\tau,0) = G^{>}(-i\tau,0) \quad (0 \leq \tau \leq \beta)$$

という関係になっています。τ が $0 \sim \beta$ に制限されているので、$G_\beta(\tau) = G^{+}(\tau,0)$ です。逆に言えば、τ が $0 \sim \beta$ ならこの関係が使えるということです。最初にやった τ による方法は t の複素平面上で特別な経路を選んだことに対応しています (ボソンからフェルミオンにしたければ反周期的にすればいいだけです)。

最後に有限温度に拡張したときの注意点に触れておきます。それは、分配関数を作るときに熱浴の静止系を設定しているという点と、ここでは相対論的な場の理論を使っていきたいという点です。この二つは矛盾を起こしていることが分かると思います。熱浴の静止系を使うということは系を固定することに対応するために、ローレンツ不変性を損失しています。さらに、虚時間法においては時間成分を空間成分から分離して特別扱いするということから、どうしても共変性に問題が起こります。しかし、これらは熱浴の 4 元速度を導入して共変的な形式で定式化を行うという回避手段があります。このことを簡単にみます。

まずは熱浴の静止系を考えることにします。熱浴の固有時間を使った 4 元速度 (固有速度) を v_μ とすれば、v_μ は

$$v^2 = 1$$

となっています (静止系を考えるので、$v_\mu = (1,0,0,0)$)。そして、4 元ベクトルというのは固有速度によって分解できるという性質があるために、4 元運動量は

$$p_\mu^{\parallel} = (p \cdot v)v_\mu \ , \ p_\mu^{\perp} = p_\mu - (p \cdot v)v_\mu$$

$\parallel$ は平行成分、$\perp$ は垂直成分を表わします。この関係と静止系であることから、4 元運動量の成分は

$$p_0 = \omega \quad (\omega = p \cdot v) \ , \ p_\mu^{\perp} = (0, p_i)$$

ということになっています。$p_\mu^{\perp}$ の内積を計算すると

$$\begin{aligned}(p_\mu - \omega v_\mu)(p^\mu - \omega v^\mu) &= p^2 - 2\omega p_\mu v^\mu + \omega^2 \\ &= p^2 + \omega^2 - 2\omega^2 \quad (p_\mu v^\mu = p_0 v_0 - \boldsymbol{p} \cdot \boldsymbol{v} = p_0) \\ &= p^2 - \omega^2\end{aligned}$$

$p_\mu^{\perp}$ は p_μ の 3 次元運動量に対応していることから、$p^2 - \omega^2 < 0$ です。このことから、ω は 4 元運動量の 0 成分に対応するローレンツ不変な量、$p_\mu^{\perp}$ はローレンツ不変な 3 次元運動量であると考えることが出来ます。つまり、4 元運動量は

$$p_\mu = \omega v_\mu + p_\mu^{\perp}$$

によって作られることになり、内積は

$$\begin{aligned}p^2 = (\omega v_\mu + p_\mu^{\perp})(\omega v^\mu + p^{\perp\mu}) &= \omega^2 + 2\omega p_\mu^{\perp} v^\mu + (p^{\perp})^2 \\ &= \omega^2 - \boldsymbol{p}^2 \quad ((p^{\perp})^2 = -\boldsymbol{p}^2)\end{aligned}$$

最後の置きかえは、$(p^{\perp})^2$ が空間的 ($(p^{\perp})^2 < 0$) であることを使っています。なので、$\boldsymbol{p}^2$ は 3 次元運動量の絶対値の二乗に対応します。この結果は簡単に適用することができて、例えば計算においてよく $\exp(\beta|E|)$ のような項が出てきますが、これを単に $\exp(\beta|p \cdot v|)$ と置き換えればいいです。このようにして、熱浴の 4 元ベクトルという新しい変数が増えますが、共変な形式での定式化が可能になっているので、有限温度系でもローレンツ共変性はなくなっていません。

　しかし、虚時間法では離散的なエネルギー ω_n が導入されるために、明らかに時間成分と空間成分は区別されます (3 次元運動量は連続的)。この点は虚時間法を使う限り諦めなければいけないんですが、実時間を使った定式化を行えばこんな区別がなくなって、完全に共変的な定式化ができます。こんな性質から、虚時間法では共変性を意識する意味がないので、大抵は何も言わずに静止系を使います (たとえ見かけを 4 元ベクトル的に書いたとしても、本質的に時間成分と空間成分を分離しなくてはいけない)。