量子カオス系のエネルギー準位統計

— エルゴードから拡散領域まで —

龍谷大学 理工学部　前直弘，飯田晋司 [1]

研究会では次の論文の内容を紹介しました：
cond-mat/0210444, N. Mae and S. Iida, Energy level statistics in weakly disordered systems: from quantum to diffusive regime

1 はじめに

電磁波や弾性波，あるいは電子波などが不規則媒質中を伝播する際に受ける多重散乱の結果として生じる物理量のゆらぎの統計的性質の研究は，理論上 (古典軌道不安定性のある系の量子・古典対応，量子カオス) の観点からも，応用上 (ナノスケールの電子回路の特性) の観点からも興味ある課題です。

こうしたランダム系の統計的性質は，不純物ポテンシャルの摂動展開に基づくダイアグラム展開法，半古典近似 (物理量を古典軌道（特に周期軌道）の重み付きの和としてあらわす Gutzwiller を緒とするアプローチをここでは半古典近似と呼ぶことにする。)，ランダム行列モデルなどの手法を用いて研究されてきました。それぞれのアプローチの守備範囲についての従来の認識は以下の様になると思います：

ランダム行列モデル:

エルゴード時間 (波動関数が系全体に広がる時間) より長い時間スケールに着目し，系の空間依存性が無視できる場合に，多くの統計量が正確に計算できる。これらの統計的性質は (時間反転対称性，空間回転対称性などの幾つかの基本的対称性によって分類される) ランダム系の集合が共通に持つ普遍的性質と考えられている。

不純物ダイアグラム展開法:

短距離の白色ガウス型ランダムポテンシャル中を運動する1粒子グリーン関数の積の統計平均を摂動展開により計算できる。展開パラメターは $1/g$ (g は系の無次元化されたコンダクタンス)。展開に現れる拡散モードのうち，空間依存性のない波数 $\mathbf{q}=0$ のモードのみを残した結果 (これは $g \to \infty$ の極限に相当する) がランダム行列モデルの結果に対応する。エネルギー準位相関関数に現れる振動などランダム行列モデルの結果に含まれる非摂動的効果は再現できない。系の不規則さが古典軌道の不安定性に起因する場合については系統的な計算方法は知られていない。

[1] E-mail: iida@math.ryukoku.ac.jp

半古典近似:

エネルギー準位相関関数は古典周期軌道の2重和として表される。対角和のみをとる近似によりダイアグラム展開法の $\mathbf{q}=0$ モードのみの結果を再現する。$\mathbf{q}\neq 0$ の拡散モードに対応するものが何であるかはよくわかっていない。種々の系，特にビリヤード系への適用が多く行われている。対象とする現象にどのような古典軌道群の干渉効果が寄与しているかがわかりやすい。

まとめると，ランダム行列モデルは制限された状況下ではあるが正確な計算ができる。ダイアグラム展開法や半古典近似は摂動展開の範囲に限るが適用範囲が広い，ということになるでしょう。

しかし，数年前，超行列法(グリーン関数の積のランダムポテンシャル平均を超行列の場で書かれた生成関数から計算する方法 [1])の枠内で，Andreev，Altshuler 達 [2](以下 AA と略記)は2エネルギー準位相関関数 $R(s)=\Delta^2\langle\rho(E)\rho(E+\omega)\rangle$ (ρ はエネルギー準位密度，Δ は平均の準位間隔，$s=\omega/\Delta$ は Δ を単位として測った準位間隔) を計算し，$1/g^2$ までの摂動展開の枠内においても，通常の展開点の周りの摂動展開 (ダイアグラム展開法の結果を与える) に加えて新しい展開点のまわりの展開を加えることにより“非摂動的”振舞いが再現できることを示しました。更に，超行列法よりも適用範囲が広いレプリカ法 [3] や Keldysh グリーン関数法 [4] でも AA の結果が再現され，この新しい展開点の持つ意味が興味を引いています。

しかし，AA の結果は摂動展開を用いている為，$g\gg 1$ とともに $s\gg 1$ が要求されるため，$g\to\infty$ の極限でも s が小さい領域におけるランダム行列モデルの結果を (例外的なユニタリークラスの場合を除いて) 再現しません。

研究会では，ユニタリークラスの場合にこの制限を取り除き，s の全ての領域 [5] で成り立つ $R(s)$ の弱局在効果 ($1/g^2$ までの展開をここでは弱局在効果と呼ぶことにする) の計算手順を報告しました。実は，ユニタリークラスの場合は AA の結果が正しい弱局在の表式を与えることは Duistermaat-Heckman による定理から陰に保証されているようです。[6] ここで我々が目的とするのは，それを (他の場合にも若干の修正で使えるような) 具体的な計算で示すことです。

2 モデルと計算手順

ランダムポテンシャル中を運動する1粒子の2エネルギー準位相関関数 $R(s)$ は超行列 σ モデルでは以下の積分で表されます：

$$R(s)=\frac{1}{16V^2}\mathrm{Re}\int dQ\,e^{-S(Q)}\left[\int d\mathbf{r}\,\mathrm{str}\,k\Lambda Q(\mathbf{r})\right]^2, \tag{1}$$

$$S(Q)=\frac{\pi}{4V}\int d\mathbf{r}\,\mathrm{str}\left[\frac{D}{\Delta}(\nabla Q(\mathbf{r}))^2+2is^+\Lambda Q(\mathbf{r})\right]. \tag{2}$$

ここで，V は系の体積，D は拡散係数，場の量 $Q(\mathbf{r})$ はユニタリークラスの場合は 4×4 の超行列となります。全ての場所 $\mathbf{r}$ で $Q(\mathbf{r})$ が一様に動くモード (これを波数 $\mathbf{q}=0$ モードと呼ぶ)，$Q(\mathbf{r})=Q$，のみを残した場合，$R(s)$ は

$$R(s)=\frac{1}{2}\mathrm{Re}\int_1^\infty d\lambda_B\int_{-1}^1 d\lambda_F e^{i\pi s^+(\lambda_B-\lambda_F)}=\frac{\cos(2\pi s)-1}{2\pi^2 s^2} \tag{3}$$

となります。λ_B と λ_F は Q を表す変数の1部です。上式の積分領域の1つの端点，$(\lambda_B, \lambda_F) = (1,1)$ は，$Q = \Lambda = \mathrm{diag}(1,1,-1,-1)$ に対応し，これが通常の摂動展開点となります：$Q(\mathbf{r}) = \Lambda + \delta Q(\mathbf{r})$ とおき，δQ について摂動展開を行った結果がダイアグラム展開法と同じ結果を与えます。AA の新しい展開点 $Q = \mathrm{diag}(-1,1,1,-1)$ は積分領域のもう1つの端点，$(\lambda_B, \lambda_F) = (1,-1)$ に対応しています。

さて，AA の結果が $s \gg 1$ の領域でしか成り立たないのは，$\mathbf{q} = 0$ モード については $s \to 0$ で復元力が働かず摂動展開の妥当性が保証されないからです。[7] この困難は摂動的扱いを $\mathbf{q} \neq 0$ モードに限り，$\mathbf{q} = 0$ モードは正確に積分することにより回避できます。実は，この方向の研究は Kravtsov, Mirlin (以下 KM と略記)[8] により既に行われています。KM は行列 $Q(\mathbf{r})$ を以下の様に分解し；

$$Q(\mathbf{r}) = T_0{}^{-1}\tilde{Q}(\mathbf{r})T_0 \qquad , \tag{4}$$

T_0 が $\mathbf{q} = 0$ モードを，$\tilde{Q}(\mathbf{r})$ が他の $\mathbf{q} \neq 0$ モード を表すとしました。$\mathbf{q} \neq 0$ モードについての適当な次数までの摂動計算の結果，$R(s)$ は $\mathbf{q} = 0$ モードを表す少数の変数の定積分になり，これは摂動に頼らずに評価可能です。しかし，KM は ω が小さいと仮定してエネルギー項 (式 (2) の第2項) の指数関数を展開しているので，彼らの結果は $s \ll g$ の場合にしか妥当ではありません。エネルギー項を指数関数の肩に乗せたままでの計算が困難になる理由は，摂動展開に現れる $\mathbf{q} \neq 0$ モードの伝播関数が $\mathbf{q} = 0$ モードの変数に依存する為です：

$$\Pi(\mathbf{q}; \lambda_g, \lambda_{g'}) = \frac{2V}{\pi}\left(\frac{D}{\Delta}|\mathbf{q}|^2 - \mathrm{i}s^{+}\frac{\lambda_g + \lambda_{g'}}{2}\right)^{-1}, \qquad g,\ g' = \mathrm{B},\ \mathrm{F} \tag{5}$$

摂動計算により $\mathbf{q} \neq 0$ モードを消去した後に得られる積分は，従って，被積分関数として $\Pi(\mathbf{q}; \lambda_g, \lambda_{g'})$ の無限和や無限積

$$\mathcal{D}(s, \lambda_B, \lambda_F) = \prod_{\mathbf{q} \neq \vec{0}} \frac{\Pi(\mathbf{q}; \lambda_B, \lambda_B)\Pi(\mathbf{q}; \lambda_F, \lambda_F)}{\Pi(\mathbf{q}; \lambda_B, \lambda_F)^2}, \tag{6}$$

を含んでおり，自明ではありません。

ところが，以下に示すように，少なくともユニタリークラスの場合，積分の順序を逆にして，最初に $\mathbf{q} = 0$ モードを積分してしまうことができます。得られた結果 (これは積分領域の端点，$(\lambda_B = 1, \lambda_F = \pm 1)$，で評価されている) に対しての $\mathbf{q} \neq 0$ モードの摂動展開は問題なく行えるというわけです。

3　$\mathbf{q} = 0$ モードの積分

いくらかの変形の結果，$R(s)$ への $\mathbf{q} = 0$ モードの寄与は以下の形になります：

$$R_2(s) = \frac{1}{2}\mathrm{Re}\int dW\, J(W) \exp\left[-\frac{\pi D}{4V\Delta}\int d\vec{r}\, \mathrm{str}\left(\nabla\tilde{Q}(\vec{r})\right)^2\right] I(s, W) + O(1/g^3), \tag{7}$$

ここで

$$I(s, W) = \int_1^{\infty} d\lambda_B \int_{-1}^{1} d\lambda_F f(\lambda_B, \lambda_F) g(\lambda_B, \lambda_F), \tag{8}$$

$$f(\lambda_B,\lambda_F)=\frac{1}{(\lambda_B-\lambda_F)^2}e^{\mathrm{i}\pi s^+(\lambda_B-\lambda_F)}, \tag{9}$$

$$g(\lambda_B,\lambda_F)=e^{\mathrm{i}\pi s^+(\lambda_B A-\lambda_F B)}\left[\lambda_B\ (1+A)-\lambda_F\ (1+B)\right]^2. \tag{10}$$

であり，A，B は $\mathbf{q}\neq 0$ モードの変数で表されています。λ_B，λ_F についての積分は $(\lambda_B-\lambda_F)^{-2}=\int_0^\infty te^{-t(\lambda_B-\lambda_F)}dt$ を用いると，指数関数の積分となります。積分後の表式には一般に

$$E_n(a)=\int_1^\infty\frac{e^{-ax}}{x^n}dx \tag{11}$$

の形の積分が残りますが，これは $\mathbf{q}\neq 0$ モードの変数を含んでいないので問題を生じません。

このような手順で計算を行うと，端点 $(\lambda_B,\lambda_F)=(1,-1)$ から現れる $\mathbf{q}\neq 0$ モードの $1/g^2$ までの摂動展開は結局 0 次のみが残り

$$R_2^{(1,-1)}(s)=\frac{\cos 2\pi s}{2\pi^2 s^2}\mathcal{D}(s,1,-1)+O(1/g^3). \tag{12}$$

という結果が得られ，これは確かに AA の得た結果と一致しています。

4 まとめと希望

以上の力ずくの計算により，ユニタリークラスの場合に AA の結果が再現されました。この計算の過程からは全く自明ではありませんが，Duistermaat-Heckman の定理が (多分) 保証する通り，$(\lambda_B,\lambda_F)=(1,-1)$ の周りの摂動展開に現れる伝播関数はすべて相殺しました。

AA の結果が $s\to 0$ の正しい振舞いを与えない他の場合 (直交，シンプレクティックあるいはカイラル等) の対称性クラスに対する同様な計算が当然次の課題となります。例えば直交クラスの場合，やはり $\mathbf{q}=0$ モードで残る積分の端点が AA の新しい展開点に対応しており見込みがあるかもしれません。この場合は，$\mathbf{q}=0$ モードの変数の積分を正確に行うことはもはや期待できないでしょう。しかし，ここで得られたユニタリーの場合の結果は式 (8) に対する部分積分：

$$\begin{aligned}I(s,W)=&\left[\left[F(\lambda_B,\lambda_F)g(\lambda_B,\lambda_F)\right]_{\lambda_B=1}^{\lambda_B=\infty}\right]_{\lambda_F=-1}^{\lambda_F=1}-\left[\int_1^\infty d\lambda_B\,F(\lambda_B,\lambda_F)\frac{\partial}{\partial\lambda_B}g(\lambda_B,\lambda_F)\right]_{\lambda_F=-1}^{\lambda_F=1}\\&-\left[\int_{-1}^1 d\lambda_F\,F(\lambda_B,\lambda_F)\frac{\partial}{\partial\lambda_F}g(\lambda_B,\lambda_F)\right]_{\lambda_B=1}^{\lambda_B=\infty}+\int_1^\infty d\lambda_B\int_{-1}^1 d\lambda_F F(\lambda_B,\lambda_F)\frac{\partial^2 g(\lambda_B,\lambda_F)}{\partial\lambda_B\partial\lambda_F}\end{aligned} \tag{13}$$

によっても計算できます。ここで，

$$F(\lambda_B,\lambda_F)=-\int_{-\infty}^{\lambda_F}db\int_{\lambda_B}^\infty da\,e^{\mathrm{i}\pi s^+(a-b)}\frac{1}{(a-b)^2} \tag{14}$$

は $f(\lambda_B,\lambda_F)$ の不定積分です。部分積分の結果，残っている積分は $1/g$ のより高次となる為，λ_B，λ_F についての積分が表面項により評価でき，考えている $1/g$ の範囲で同じ結果が得られます。同様な仕組みが他の対称性クラスについても働いていることを期待しています。

この報告では，ランダムポテンシャル中の 1 粒子の 2 エネルギー準位相関関数の計算法という非常に限定された話題について述べました。しかし，もし，通常の展開点のまわりの摂動展開の各項にダイアグラムや古典軌道群を対応付けることができたのと同様なことが新しい展開点のまわりの摂動展開にもできれば，ランダム系のみならず，より一般の摂動が使えない系を取り扱う新たな知見が得られるかもしれない，などと希望しています。

謝辞

本研究会への参加を呼びかけていただいた世話人，特に中村勝弘氏に感謝いたします。髙橋和孝氏には有益な議論をしていただきました。感謝いたします。

参考文献

[1] K. B. Efetov, *Supersymmetry in Disorder and Chaos* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).

[2] A. V. Andreev and B. L. Altshuler, Phys. Rev. Lett. **75**, 902 (1995); A. V. Andreev, B. D. Simons, and B. L. Altshuler, J. Math. Phys. **37**, 4968 (1996).

[3] A. Kamenev and M. Mézard, Phys. Rev. B **60**, 3944 (1999).

[4] A. Altland and A. Kamenev, Phys. Rev. Lett. **85**, 5615 (2000).

[5] 計算の元となっている超行列 σ モデルは条件: $\omega \ll 1/\tau$ (τ は平均弾性散乱時間) の下での有効理論なので，このでの "全ての領域" は $\omega \ll 1/\tau$ を意味します。

[6] M. R. Zirnbauer, cond-mat/9903338.

[7] 実は，$(\lambda_B, \lambda_F) = (1, -1)$ の展開点では $\mathbf{q} = 0$ モードは $s \to 0$ で不安定になります。AA はこの為，計算の途中段階で正則化のための外部変数を導入しています。

[8] V. E. Kravtsov and A. D. Mirlin, Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz. **60**, 645 (1994) [JETP Lett. **60**, 656 (1994)].