

パデ解析による波動関数の特異性診断 —その式—¹

山田物理学研究所 山田弘明²
立命館大学 理工学部 池田研介³

(2012年12月///日受理)

「自然、互性妙道之号也。互性何乎、曰、
無始無終土活真自行、小大進退」⁴

abstract: 前稿では、パデ解析 (パデ近似) の紹介と、特異点をもつ関数に対してパデ解析を適用し、数値的に特異性を診断する方法について議論した。特に、自然境界に関わる空隙冪級数とランダム冪級数に関する定理を紹介し、パデ解析の極の多くはそれらの関数の自然境界周辺に沿って分布することなどを確かめた。本稿の目的は、パデ解析を用いて簡単な量子状態を表す波動関数の特異性診断を試みることである。具体的には、特別なモデル——次元強結合モデルの、不純物状態、Anderson 局在状態、およびハーパーモデルの局在状態——の特異性を診断する。Anderson 局在状態、ハーパーモデルの局在状態等は自然境界を持ち、潜在的に特異性をもつ量子状態であることが示唆される。また、力学系における KAM トーラスの崩壊現象に対するパデ解析やハーパーモデルの局在・非局在転移の対応も示される。これまでの課題と密接に関係する話題としてポテンシャル (母関数) の特異性と局在・非局在問題の関係も議論する。

1 はじめに

前稿 (以下 [I] とする) では、特異点をもつ簡単なテスト関数に対してパデ解析を適用し、極や零点の分布により数値的に関数の特異性を検出する方法について議論した⁵。特に、自然境界を持つ空隙級数やランダム級数に対しても、パデ解析の極や零点の分布によりその特異性を表現できることやその時の問題点を議論した [1]。本稿ではパデ解析についての説明は省くので、パデ解析に関しては [I] もしくは文献 [2, 3, 4]などを参照すると

¹この原稿は二部構成の第二部である。

²E-mail: hyamada[at]uranus.dti.ne.jp

³E-mail: ahoo[at]ike-dyn.ritsumeai.ac.jp

⁴安藤昌益「自然真営道」

⁵[I]でも言及したように、パデ近似の情報を様々活用し関数の特異性の解析を目的とすることから、パデ近似を「パデ解析」と表現してある。

よい。[I]の冒頭で記したように、我々の研究における興味は、量子波動関数と不可逆性の起源との関係にある。念のため、再掲しておく。

量子系に於ける「脱可干渉性」あるいは「自発的不可逆性」の発生を促すような数理的構造が何かをつきとめたい。それらを導く量子系の波動関数は、特異な構造をもつものであるに違いない。そのような複雑さ、その解析的特異性を解明する第一歩の試みを「物性研究」という public な場を借りて人に見られつつまとめてみたいというのが、本稿の主題である。

本稿では、主に簡単な量子系として、一次元強結合モデル、

$$u(n-1) + u(n+1) + V_n u(n) = E u(n), n = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

を取り扱う。 E と V_n はエネルギーとサイト n 上のポテンシャルである。典型的量子状態である不純物状態 [5]、Anderson-局在状態 [6, 7]、ハーパーモデル [8, 9, 10, 11, 12] の局在状態に対する固有関数に対し、パデ解析による特異性診断を行い、不純物状態は極を、Anderson-局在状態やハーパーモデルの固有関数は自然境界をもつ可能性を示唆する。一次元系は数値計算での取り扱いの容易さと数学的にもその性質がよくわかっている等々多くの利点があるが、このような極めて特殊なモデルを扱う理由は以下でおいおい説明してゆくことにする⁶。

Berryらは初めて量子波動関数の解析性に関する研究を行った。それを説明しながら我々の目的を議論しよう。彼らは、任意の次元において、Dirichlet型境界条件で箱型ポテンシャルに閉じ込めた波動関数の時間発展を調べ、時間的にも空間的にもフラクタル分布を生み出すという結果を得ている [13]。もともと、不確定性原理により疎視化されている量子系で、無限精度が必要なフラクタルな波動が可能か否かという問題設定であったが、これが肯定的に示されたわけである⁷。その後、Wojcikらは、より広いクラスのポテンシャルに対し、シュレーディンガー方程式の解として任意のフラクタル次元の波動関数を構成する方法を示した [14]。この波動関数がいたるところで微分不可能であり解析性を破っていることは明らかであるが、これは、初期状態としてデルタ関数の波束の特異性が時間発展により全空間に伝播した結果であり、[I]で論じたSzegőの定理の一応用例と解釈もできる。すなわち、デルタ関数を無限大井戸型ポテンシャルに閉じ込められた量子系の固有関数で展開した場合、sin波の任意高調波成分を同じ割合で含み、時間発展は確率振幅の位相を変えるだけになる、それは振幅が有界のFourier展開であるからSzegőの定理より波動関数のサポート（実軸）そのものが自然境界になるわけである。(Szegőの定理に関しては、本稿の付録Bも参照のこと [15].)

Berryらの仕事は、可積分系の典型と考えられる単純な系でも特異な初期条件に対する波束の伝搬が特異な波束を作り出す事を示したが、本論文で扱う量子系は初期条件の選

⁶数学的には、多次元の局在問題に関して、移動端の存在や非局在状態の存在なども証明できていない。厳密に証明されているのは、ベーテ格子の場合と2次元系のスペクトルの端の近傍での局在などのみである。

⁷これは、数学的意味においてのフラクタルである。数学的にフラクタルとは無限のスケールでスケール関係式が成立する場合に定義されるが、物理的には、数ケタにわたりスケール関係式が成立すれば、フラクタルというのが慣例である。

扱の如何に関せず、常に特異性を含むような系、すなわち固有状態そのものが特異的な系である。我々は、そのような系が十分広がった系（厳密には統計的な意味で並進対称な無限次元の Hilbert 空間で記述される系）では「潜在的に」普遍的であり、その意味において、そのような量子状態は「自然な存在」であると考えたいのである。この可能性を追求できる最も簡単なモデルとして一次元の離散系（強結合モデル）を取り扱う。

特に、式 (1) のポテンシャルに対応するオンサイトエネルギー V_n として、準周期列やランダム列を用いた場合の固有状態の解析性を考える。実空間での波動関数（固有関数）の確率振幅 $u(n)$ のゆらぎを、マルチフラクタルや空間的広がりなどのスケーリングで特徴づける方法は従来から用いられているが [16, 17, 18, 19, 20]、それは実空間（実変数 n 、しかも整数値）に関する特異性しか見ていない。本来、特異性を問題にするならば波動関数を複素空間全体でみた時の特異性を問題にすべきであろう。それによって実面だけで見れば極めて稀にしか起こらないように見える特異現象が、複素空間では極めてありふれて（まさに「普遍的」に）起きている事が見えてくる可能性がある⁸。

本稿の内容は次のように構成されている。2節の内容は力学系の話であるが、ハーパーモデルなどの量子系と関連する。内容は本節最後に説明する。3節において、量子状態を表現する波動関数に対してパデ解析を用いて、その解析性を調べるというアイデアの紹介と必要な準備を行い、次の結果を示す。不純物状態に対しては、その固有状態の特異性が極によりの確に表現できる (3.2 節)。しかし、一般的なアンダーソン局在状態に対しては、いくつかの極で表現できる比較的なめらかな状態なのか、自然境界をもつ状態なのかを判断するには、パデ解析で判断するには不十分な結果であった (3.3 節)。一方、ハーパーモデルの固有関数の解析性は自然境界もつ可能性を示唆した (4 節)。ここでは、波動関数の解析性という観点から 指数関数、冪関数のエンベロープを超えて、ゆらぎの性質（例えば、フラクタル性）が重要になる。さらに、これらの結果と独立に、べき級数関数の自然境界に関するいくつかの数学的定理に基づき、ランダム系やハーパーモデルの固有状態が自然境界をもつ可能性を議論する (5 節)。最後の 6 節において、最近発表された Breuer と Simon の論文 [21] に基づいて一次元局在問題に関する局在条件とポテンシャル母関数に対する自然境界存在条件の間の極めて深い parallelism を、小谷理論 [22] を援用しつつ妄想する。付録ではハーパーモデルの基本的性質、べき級数の自然境界の存在に関する定理、ランダム系の局在に関してグリーン関数による記述や、小谷理論に関して記してある。

力学の問題において初めて自然境界の存在が示唆されたのは、可積分系への摂動印加後に生き残る KAM トーラスの受ける損傷に関する研究である。特に、力学軌道のストロボ写像のモデルである標準写像系の KAM トーラスの解析性とハーパーモデルの固有関数の解析性との類似性は、参考になる点が多い。KAM トーラスの存在やその解析性の破れは力学変数を角度変数 θ の関数として表す共役関数（当然 2π 周期関数である）の Fourier 級数の解析性として表され、様々な研究がなされている [23, 24, 25, 26, 27]。例えば、Fourier

⁸C.G. ユングは人間の無意識の構造を解析する精神分析学の意義を複素空間への解析学の拡張になぞらえた。このひそみにならえば、量子状態の複素構造の探求は「観測可能な実世界＝”意識”世界」を「観測の彼岸＝”無意識”世界」に拡張した量子状態の研究という事になるうか。

級数の収束性を調べる為にパデ解析が使われ、自然境界の存在が示唆されている。この力学系と強い類似性をもつハーパーモデルの固有関数も自然境界をもつことを期待し、パデ解析による診断を行うわけである。それゆえ、量子系の特異性に対するパデ解析による診断に進む前に、まず次節においてこれを概観することから始めよう。

2 力学系の共役関数の特異性

力学系における KAM トーラスの解析性の破れの議論とハーパーモデルとの対応を簡単に示す。トーラスに対して自然境界の存在を初めて示唆したのは Greene と Percival である [28]。本稿では詳細を議論しないが、以下で議論する局在・非局在問題は標準写像の量子版である量子撃力回転子の局在非局在問題とも密接に関係している。その量子版を変換すると、実はハーパーモデルに類似したモデルが得られるという錯綜した関係があるのだがそれについては、付録 D を参照されたい。

2.1 標準写像とハーパーモデルの関係

強結合モデルのシュレーディンガー方程式 (1) において、 $V_n = 2V \cos(2\pi\alpha n + \beta)$ (α は無理数、 β は初期位相だが簡単のため $\beta = 0$ とする。) とおいたものをハーパーモデル、またはハーパー方程式という。ここでは、どうしてハーパーモデルを使うのかという理由のひとつを、力学系のトーラス破損問題との類似点から考察しておく。次の変数 Θ について標準写像を考える。

$$\Theta_{n+1} + \Theta_{n-1} - 2\Theta_n + K \sin \Theta_n = 0, \quad (2)$$

K は非線形パラメータである。 $K = 0$ ならば作用変数 $I_n = \Theta_{n+1} - \Theta_n$ はある保存量 ω になって解 $\Theta_n = n\omega + const$ はトーラス上のストロボ写像と同相になる。KAM 理論によると”十分有理数から遠い”無理数 ω に対して、印加摂動 K が十分小さければこのトーラス運動は連続的に変形されるものの存在が保証される。即ち (Θ, I) は真の角度変数 θ でパラメトライズされ、 θ の運動は $K = 0$ の場合の運動をそのまま引き継いで (むしろ $K = 0$ で $\theta = \Theta$)

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \omega, \quad (3)$$

に従って運動し、 $(\Theta, I) = (\theta + F(\theta), G(\theta))$ を満たす 2π -周期関数の $F(\theta), G(\theta)$ が存在し F, G は $K \rightarrow 0$ で 0 になる⁹。明らかに、関数 $F(\theta)$ は

$$F(\omega(n+1) + \theta_0) - 2F(\omega n + \theta_0) + F(\omega(n-1) + \theta_0) = K \sin(F(\omega n + \theta_0) + \omega n + \theta_0), \quad (4)$$

を満たす。 $\theta = \omega n + \theta_0$ は任意の実数と考えていいので、上式は関数方程式

$$F(\theta + \omega) - 2F(\theta) + F(\theta - \omega) = K \sin(F(\theta)), \quad (5)$$

⁹ F の定義で θ を別にしたのは、最終的に表示が simple になるため。

と考える事ができる。この関数方程式の解を、 K に関して Taylor 展開、 θ に関しては 2π 周期関数なので Fourier 展開する。(この 2 重級数を Lindstedt 級数と呼ぶ。)

$$F(\theta, K, \omega) = \sum_{n=1} F_n(\theta, \omega) K^n = \sum_{n=1} \sum_{k=1} F_{n,k} K^n e^{ik\theta}. \quad (6)$$

この Lindstedt 級数に関して、変数を θ, K, ω にとったそれぞれの場合に対する解析性がパデ解析を使って研究されている [23, 24, 25, 26, 27, ?]。Berretti たちは、 θ を固定し、 K のべき展開に対しパデ解析を用いた様々な研究を行っている。例えば、複素 K 平面では、Lindstedt 級数の収束半径に対応する $|K| = K_c$ で解析性が破れ、トーラスを崩壊に導く臨界値 K_c が求められる¹⁰。ここで、 $F(n\omega + \theta_0)$ が解ならば、 θ_0 で微分する事によって $\Psi_n = dF(n\omega + \theta_0)/d\theta_0$ とおけば

$$\Psi_{n+1} + \Psi_{n-1} + (K \cos(n\omega + \theta_0 + F(n\omega + \theta_0)) - 2)\Psi_n = 0 \quad (7)$$

を満たす。即ち、 Ψ_n は式 (1) で $V_n = 2V \cos(2\pi\alpha n + \theta_0)$ とおいたハーパーモデルに非常に近い。特に微小な変移 F を無視すれば完全にハーパーモデルに一致する。即ち不変曲線 $F(\theta)$ の角度微分はハーパー様方程式のある固有状態になっている。

このことから、KAM トーラス解の解析性とハーパーの固有状態の解析性の対応を期待し、ハーパーモデルを調べるわけである。もちろん、式 (7) は一般に非線形であり、線形方程式のハーパーモデルとの間には異なる点も存在する。大きな違いは KAM トーラス解の場合は、Harper 型方程式の \cos 型ポテンシャル部分に不変曲線 $F(n\omega + \theta_0)$ そのものが入っているが、ハーパーモデルの場合は \cos 型ポテンシャルが常に整関数であることである。また、この対応はハーパーモデルのひとつの固有関数についての対応であることにも注意が要る。さらに、標準写像の KAM トーラス解の場合を考えると、 $K < K_c (\sim 1)$ の近可積分、即ち非周期的なトーラスが存在してそれに随伴する離散シュレディンガー様方程式 (7) に対し、弱い準周期ポテンシャルが印加されることが、ハーパーモデルの場合、弱いポテンシャル強度 $0 < V < 1$ の準周期摂動 $V(n)$ が加わり実空間の固有関数が規格化不能な非局在状態 (extended states) になることと対応する。これらは、標準写像の KAM トーラスが解析性を破った状態、すなわち実空間においても解析性が崩壊した状態である。そこで、本論文では、ハーパーモデルの場合、実空間での固有関数が規格化可能な局在状態 ($V > 1$) の特異性を複素空間に広げて調べることにする。

参考までに、Aubry の考察した、1D 固体の整合不整合転移のモデルである Frenkel-Kontorova モデルとの対応は次のようになる [29, 30]。Frenkel-Kontorova モデルでは、エネルギー関数の極小構造 (基底状態) を決定する規則が標準写像になり、極小構造まわりのゆらぎを与える phonon の固有状態が (7) 型になり、特に (7) が phonon の並進移動モード¹¹である。その結果、このモードが格子系のエネルギースペクトルのバンドギャップ中にあるか否かで系の構造の安定性が判定されることを示した。もしゼロモードがバン

¹⁰関数方程式 (4) の左辺の 2 階 ω 差分演算子 D_ω の固有値 $2i \sin(\pi\omega)$ において、共鳴による小さな分母の問題が発生し、展開係数の計算が困難になる。十分有理数から遠い Diophantine 数のような無理数に対しては、Kolmogorov の super convergence 法が KAM 定理の証明に有効であったことは有名である。

¹¹ゼロモード、または、南部-Goldstone モードともいう。

ドギャップの中にあれば、不安定化し、phonon モードの指数関数的局在状態 (pinning 状態) が生じる。これは、格子系とインコメンシュレートなポテンシャルの結合強度が臨界値を超えると標準写像の共役関数の解析性崩壊に伴い、並進運動状態 (sliding 状態) から phonon モードの指数関数的局在状態 への転移 (Aubry 転移) が生じることに対応する。

2.2 パデ解析による準標準写像の自然境界

ここでは、Greene-Percival の論文 [28] で用いられた準標準写像 (Semi-standard-map) の場合に対して、不変曲線の解析性をパデ解析により見ておくことにする。準標準写像は標準写像において正弦関数部分を

$$\sin \Theta_n \rightarrow e^{i\Theta_n} \quad (8)$$

と置き換えた写像をいう。これを用いる理由は、解析的取り扱いが容易であり不変曲線を調べる為の係数列を厳密に決めることができるからである。計算の詳細などは付録 A に与えてある。この場合、共役関数が満たす関数方程式は

$$F(\theta + \omega) - 2F(\theta) + F(\theta - \omega) = iKe^{(\theta + F(\theta))}, \quad (9)$$

となる。この場合の黄金トーラスの共役関数の解析性が破壊される非線形パラメータ K の臨界値は $K_c = 0.9796\dots$ で、標準写像の臨界値 $K_c = 0.9716\dots$ と近い値である。

標準写像や準標準写像などでの共役関数の解析性をパデ解析を用いた数値計算で具体的に確かめたのは、Berretti と Marmi らである [23, 24, 25, 26, 27]。彼らは Lidstedt 級数の複素 K 面での解析性を ω を変えて調べている。

準標準写像の結果をみてみよう。図 1 に K を 0.9, 0.95, 0.97 と変化させ $K = K_c$ に近づけた場合の $dF(\theta)/d\theta$ の様子を示す。この形状は確かに 4 節で見るハーパーモデルの固有状態と類似していることが確認できる。

準標準写像で ω が黄金比の場合の不変曲線が破壊される直前 $K = 0.97$ において、 $dF(\theta)/d\theta$ の特異性を対応する展開係数列 $\{nB_n\}$ を用いてパデ解析により評価したものが、図 2(b) である。(付録 A を参照。) パデ解析の極は $|K| \sim K_c$ の円に沿って分布することを示している。これは黄金比トーラスに対応する $dF(\theta)/d\theta$ が自然境界をもつことを示唆している。また、 ω が有理数の場合、 $F(\theta, K, \omega)$ の特異性は共鳴として現れる。これに対するパデ解析では、自然境界である $Re\omega$ 軸に沿って極が分布する。他に、 ω を複素数にし散逸的成分を入れた場合の結果などもあるが、詳細は Berretti らの文献を参照されたい。

[I] でも指摘したように、ここであらわれた特異点はパデ解析の特異点としての極である。しかし、パデ解析の特異点であってもその点で真の関数値が発散的になるとは限らない。分岐点型特異点が集積する場合もあり得る。実際、Greene と Percival は共役関数 $F(\theta)$ の θ に関する特異性指数の値 β を大雑把に $5/6$ と評価している。よって不変曲面が摂動によって破断する自然境界は有界である。(発散を伴わないという意味で「弱い自然境界」である。) もちろん、代数的分岐点型の特異性であっても自然境界には特異点が集

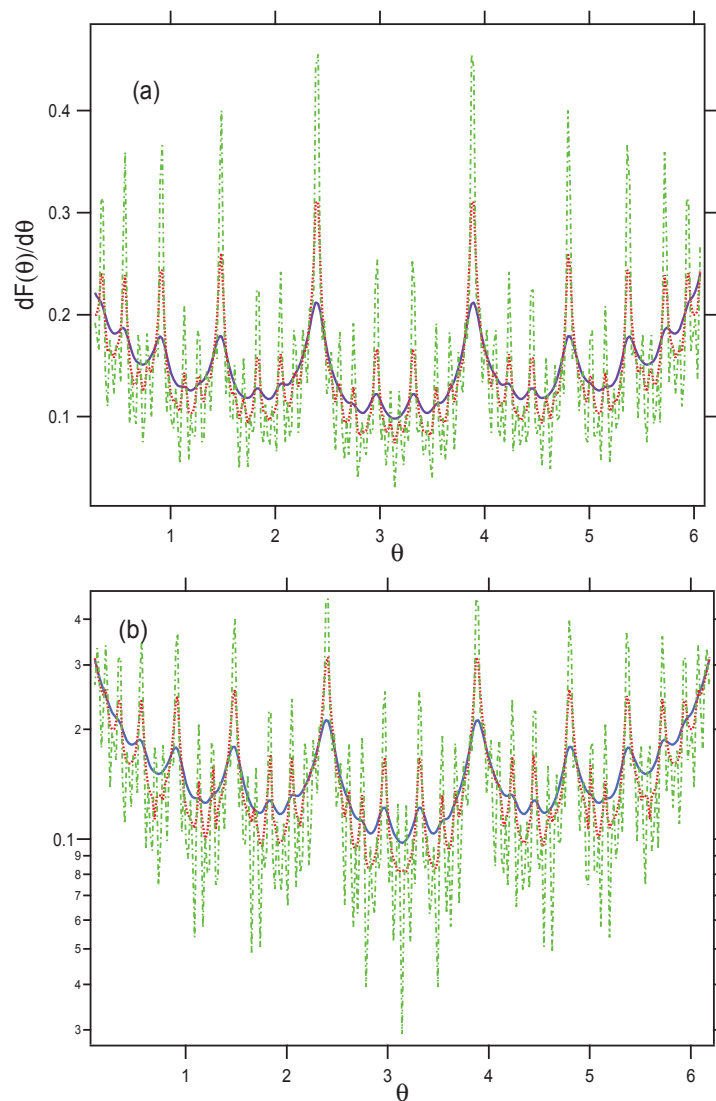


図 1: (Color online) (a) ω を黄金比とし、 $K = 0.90$ (blue), 0.95 (red), 0.97 (green) の場合のトーラス解の作用変数微分 $dF(\theta)/d\theta$ を角度変数 θ に関し表示したもの。 K が大きくなると特異的振動が激しくなる。(b) 対数スケールで表示したもの。

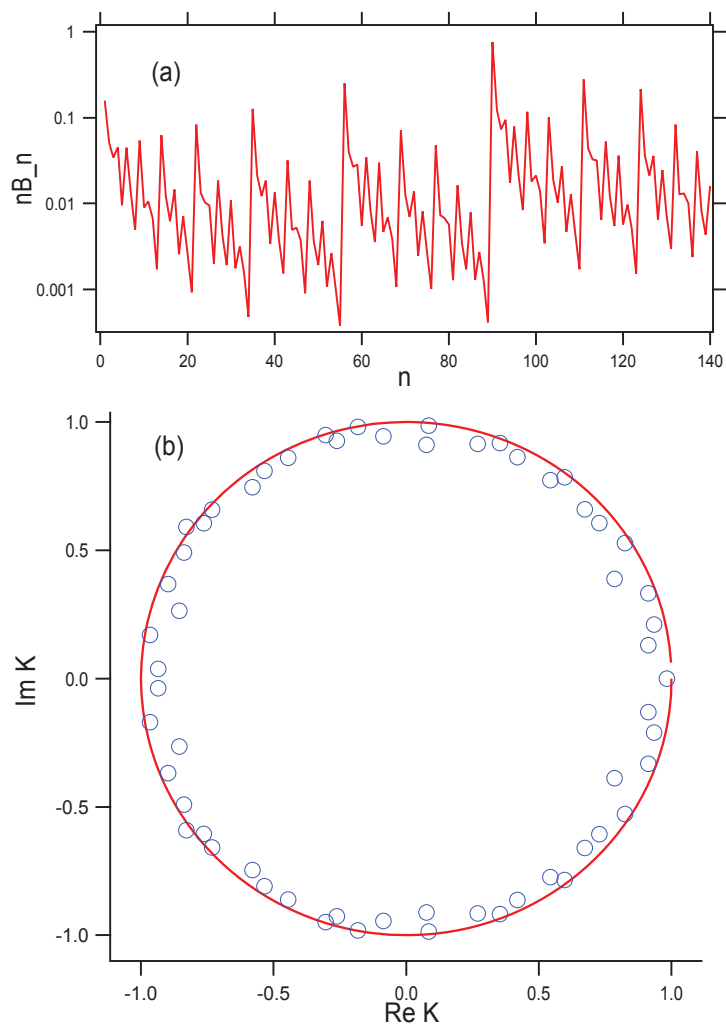


図 2: (Color online) (a) $K = 0.97$ の場合のパデ解析につかうスケールした係数 $\{nB_n\}$ 。(b) スケールした係数によるパデ解析の結果得られた極の分布。実線は単位円。付録 A を参照。

積するので、それを自然境界を越えて解析関数を接続はできない。一般に、力学系において特異性指数はポール型 ($\beta > 1$) より特異性の弱い代数的分岐点型 ($0 < \beta < 1$) であると推測されている。実際、図1でわかるように、この場合の共役関数 $F(\theta)$ の θ に関する微分 $dF(\theta)/d\theta$ は発散型になっている。

注意:(準) 標準写像の連続極限はいわゆる (準) 重力振子である。(準) 重力振り子は可積分系であり解は、楕円関数で与えられる。楕円関数はポール型の特異性を持っている。したがって、変数の連続極限をとると、標準写像での自然境界に沿って分布していたパデ解析の極は、真のポールに対応する安定な極と、不安定な spurious poles に分かれるはずである。すなわち、不安定な極は零点とキャンセルして消えていき (ghost pairs)、楕円関数の分岐点に関するパデ解析の極と零点のみが残ることになる¹²。これらの特異点に関する事情は、次節以降でみるアンダーソンモデルやハーパーモデルの量子固有状態の特異性に対するパデ解析で見えるものに類似している。ただ、これらの量子状態を表す特異性は極の集積による発散的な自然境界である可能性が強い。この発散的な自然境界を強調して**強い自然境界**という場合もある。強い自然境界については、6節で再び議論する。

3 量子状態の特異性

[I] で明記したように、パデ解析そのものの未知な部分は残るが、パデ解析が未知の関数の特異性の診断に対し効果的な方法であることに違いはない。本節と次節において、量子状態の解析性をパデ解析で診断しよう。これまで、準周期系やランダム系などの波動関数の特徴づけとして、マルチフラクタル解析や空間的広がり方などが用いられてきたが、いずれも、実空間における波動関数の振幅の揺らぎの統計性 (morphological complexity) などを用いている。これに対して、我々は波動関数の複素平面における解析性を調べることにより量子状態の解析性の診断を試みる。我々の知る限りでは、量子状態 (この場合は、固有状態) の解析性の議論は極めて少ない。

3.1 基本設定

改めて、基本設定や言葉の定義を与える。簡単な量子状態として強結合一次元モデルの固有状態を使う。シュレーディンガー方程式は、

$$u(n-1) + u(n+1) + V_n u(n) = E u(n), n = 1, 2, \dots, N \quad (10)$$

で、 E と V_n はエネルギーとサイト n 上のポテンシャルである。ここでは、全ての量子状態の振幅 $\{u(n)\}$ が実数になるように固定境界条件 $u(0) = u(N) = 0$ を用いる。解析性を

¹²力学系の Henon map の場合にも、極が頭わいに出て、この後の不純物状態のパデ解析と同じ事が起こる。また、 $K \rightarrow 0$ では、(準) 標準写像は可積分系であり共役関数も整関数で表せることに対応し、パデ解析の極や零点は $z \rightarrow \infty$ に消えていく傾向を示す。

議論するためには、連続変数の関数を作る必要がある。このため、量子状態 $u(n)$ のフーリエ級数展開をして、次のような p -表示の固有関数を考える。

$$\Psi(p) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^N e^{-ipn} u(n), \quad (11)$$

p は離散的であるが、内挿された連続変数 p に対してもなめらかに接続して定義されているので連続変数 p の関数と考える。そして $N \rightarrow \infty$ の極限をとりその解析性を調べる。

さらに、 $\Psi(p)$ を、 $q > 0$ とし $p \rightarrow p + iq (\equiv z)$ と正の虚数軸方向に解析接続すると、

$$\Psi(z) = \Psi(p + iq) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=-N_L}^{N_R} e^{-inp} e^{qn} u(n), \quad (12)$$

となる。ここで、 N_L と N_R は、振幅に関する左右の最大サイトである。 $(N = N_L + N_R + 1, N_L = N_R)$ とする。) 次に、連続関数 $\Psi(z)$ を次のように二つの部分に分けることができる。

$$\Psi(z) = \Psi_+(z) + \Psi_-(z), \quad (13)$$

$$\Psi_+(z) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N_R} e^{-izn} \Psi(n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N_R} e^{-ipn} e^{qn} u(n), \quad (14)$$

$$\Psi_-(z) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=-1}^{-N_L} e^{-izn} \Psi(n) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=-1}^{-N_L} e^{-ipn} e^{qn} u(n). \quad (15)$$

ここで、 e^{qn} は $n < 0$ に対して、収束因子として効くため、 $\Psi_-(z)$ の部分は複素平面 (z -plane) の上半平面において解析的であることがわかる。従って、量子状態 $\Psi(z)$ の特異性は $\Psi_+(z)$ から生じる。以下では、関数 $\Psi_+(z)$ または $\Psi_+(e^{i\theta}) (\equiv \Psi_+(\theta))$ と略記する) に対し、係数列 $u(n)$ を用いてパデ解析の極を数値的に調べ、その解析性を探ることが目標となる。[1] で出てきた幂級数

$$f(z) = \sum_n a_n z^n, \quad (16)$$

の展開係数や収束因子の対応をみるためには、 $z = r e^{-i\theta}$ とおけばよい。すると、

$$f(z) = \sum_n a_n r^n e^{-i\theta n}, \quad (17)$$

となり、 $a_n \Leftrightarrow \frac{u(n)}{\sqrt{N}}$, $\theta \Leftrightarrow p$, $r \Leftrightarrow e^q$ の対応があることがわかる。

3.2 不純物状態

まず最も簡単と思われる周期系中の不純物準位に対する固有状態の特異性を調べる。強結合モデル (10) において、そのオンサイトエネルギー (ポテンシャル) V_n を周期的に並べた場合 (周期系) では、エネルギーバンド構造ができ、量子状態は Bloch 状態 (もしくは

平面波)となる。この場合あるサイトエネルギーを異なったエネルギーで置き換える(不純物を混入)と、対応する不純物サイトに中心を置きそれから指数関数的に減衰する量子状態ができる。(図3(a)を参照。)この不純物状態に対して、前節の手続きに従ってパデ解析でその量子状態の特異性を診断してみよう。1不純物問題は厳密に解けて、固有状態は表現できるが、ここでは故意に、数値計算で得た局在不純物状態を調べ、パデの判定能力を試す。詳細は図3のキャプションに記した。

図3(b)と(c)に、作成した二つの不純物状態に対するパデ解析の極と零点の分布を示した。これらの固有状態はきれいに指数関数的局在を示すため、特に局在長などでスケールせず、そのままの固有状態の振幅を展開係数として使用している。 $|z|=1$ の内外で殆どの極は零点とghost pairを成し、結果的にキャンセルしている。

唯一の例外が、「正の実軸上に単位円の外側に孤立した極」である。この極の位置はパデ解析のオーダーを $M=20$ から $M=25$ に上げてても不変であり、安定で本質的な極である。まさに、このポールの存在は不純物状態に対応し、原点から極までの距離は局在長の逆数(リャプノフ数)に対応していることが確認できる。

3.3 Anderson 局在状態

次に、やや無謀かもしれないがハードルを上げてアンダーソン局在状態の解析性がパデ解析でどのように表現されるのかを観てみよう。

強結合モデルにおいて、 $\{V_n\}$ がランダムに生成された場合に、 $N \rightarrow \infty$ において、全ての固有状態は指数関数的に局在する。ここでは、 W をポテンシャル強度として $V_n \in [-W, W]$ の一様分布とする。ノードのない基底状態に対しては、不純物状態と同じようにポールで近似される。一般の局在状態でどうなるかを考える。たとえば、固有関数は図4(a)の様になる。この固有状態の指数関数的減衰領域のサイトの振幅を抜き出してパデ解析のための係数とする。

図5(a)に、このアンダーソン局在状態に対するパデ解析の極と零点の分布を示した。一見、不純物状態の場合の分布と類似して見えるが、 $|z|=1$ の内側になる極は零点と完全にキャンセルする、一方、 $|z|=1$ 周辺の極は零点とキャンセルせず残っていることがわかる。はっきりとした結論は言えないまでも、この単位円上の極の分布が、この固有関数が $|z|=1$ を自然境界とする兆候であるとみてとれる。(これは、後の5節と6節での考察からより強く示唆される。)

パデ解析そのものが正しく機能しているかどうかを確認するため、 $[I]$ において自然境界を持つ関数のパデ解析で行ったように、 $z = re^{i\theta}$ と極表示した、 $\Psi(re^{i\theta}) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(re^{i\theta})^n$ (r を固定して θ の関数としての波動関数)を元の固有関数(の一部分)と比較する。図5(b)には、実際に使った固有関数の一部分と、[20|20]パデ解析により得られた対応する固有関数部分を偏角 θ ($r=1$ に取った)に対して表示した。パデ解析自体は元の関数をよく再現していることがわかる。しかし、空隙のある級数展開でみたような激しい振動が見られないため、素直な関数のようにも思われる。より多くの係数を用いてもパデ解析の精度からの制限もあり、このレベルでは、それが自然境界 $|z|=1$ に対する極として集積してい

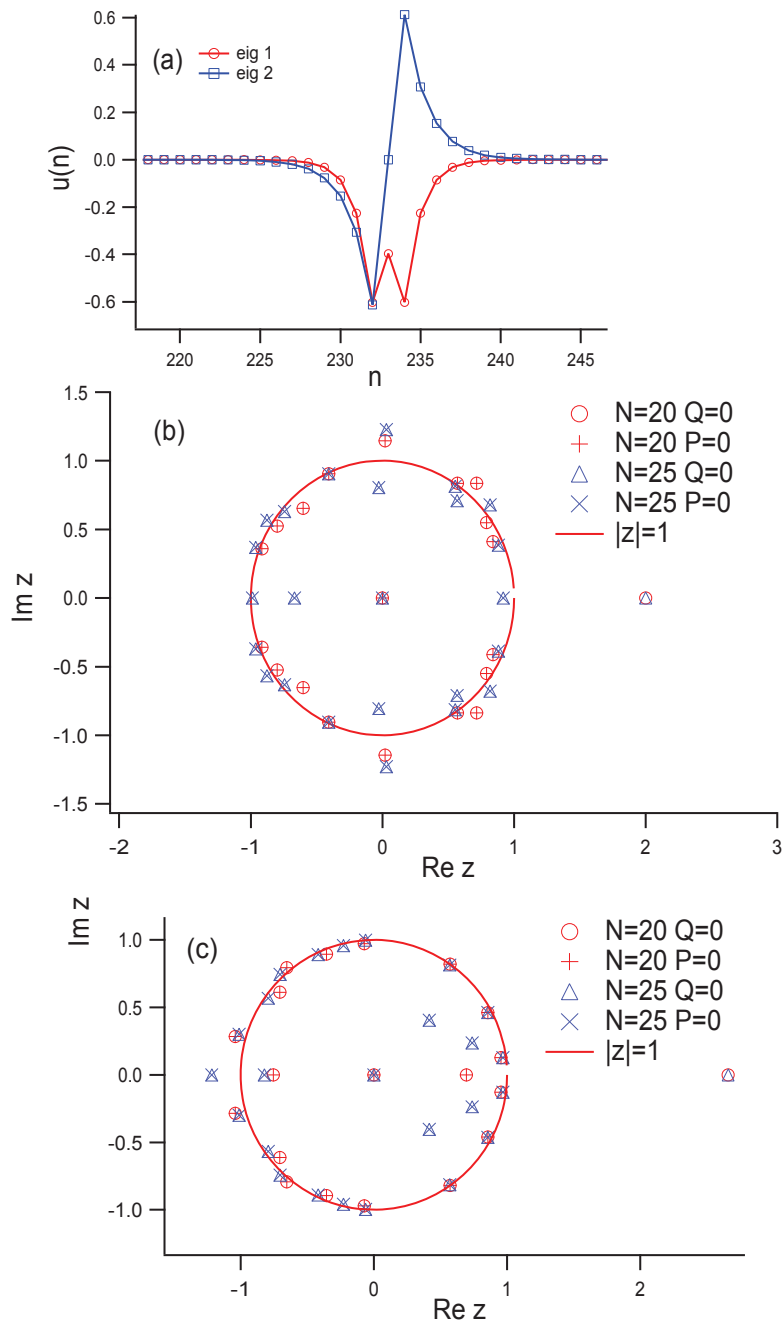


図 3: (Color online) 不純物による局在状態に対するパデ解析。(a) 局在状態. 偶数個のサイト数で、対称なポテンシャル系を使っているため、中心に対し対称と反対称となる 2 つ局在状態 ($eig1$, $eig2$) がある。パデ解析には中心から単調に、減衰または増大する領域での振幅を用いている。(b) 固有状態 $eig1$ に対する [20|20]、[25|25] パデ解析の極 (\circ , \triangle) と零点 ($+$, \times) の分布。(c) 固有状態 $eig2$ に対する [20|20]、[25|25] パデ解析の極 (\circ , \triangle) と零点 ($+$, \times) の分布。単位円 $|z|=1$ を実線で示してある。

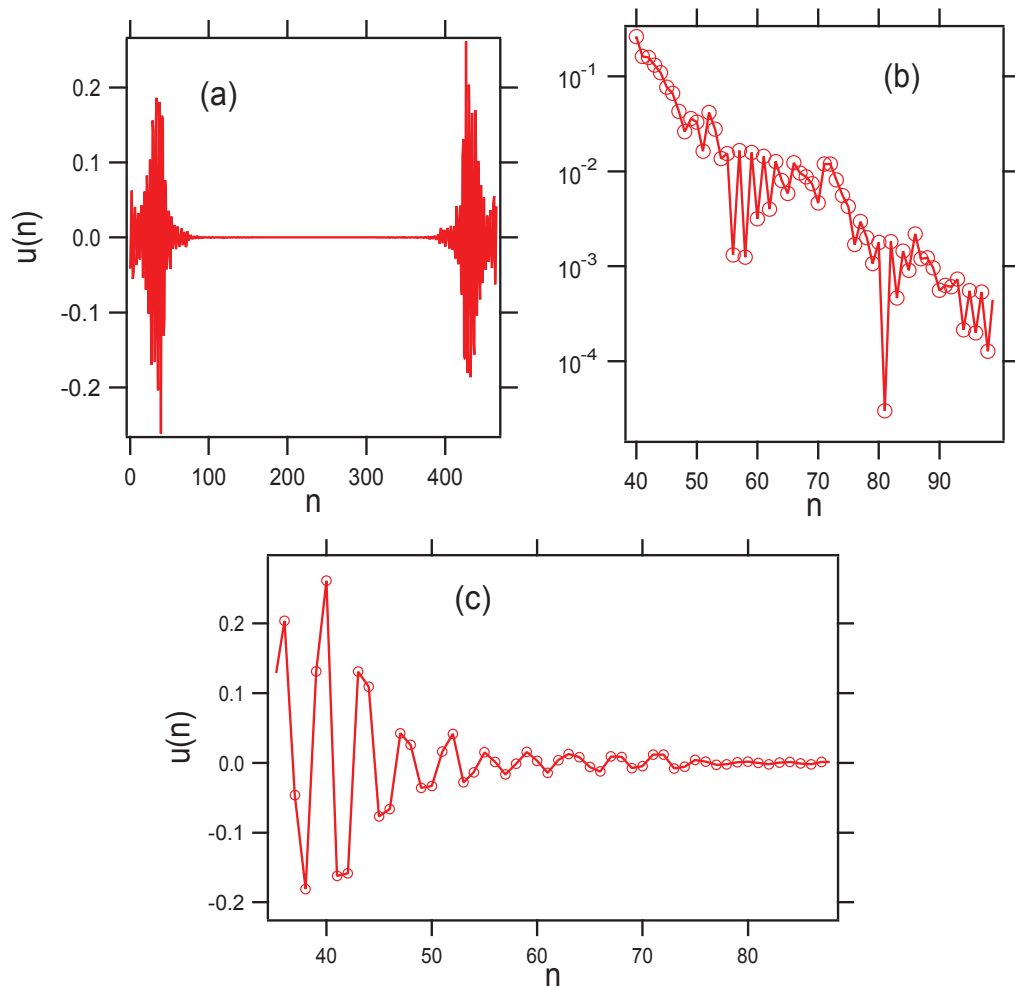


図 4: (Color online) (a) 高エネルギーのアンダーソン局在状態 (反対称の状態)。 (b) $|u(n)|$ を対数スケールでパデ解析で使う $n \sim 40$ 付近から $n \sim 90$ を表示。全体として指数関数的減衰が確認できる。 (c) 実スケールでパデ解析に用いる振幅を表示。

くのか、ただの孤立した極が複数存在するだけなのかを区別することは困難であり、曖昧さが残る。

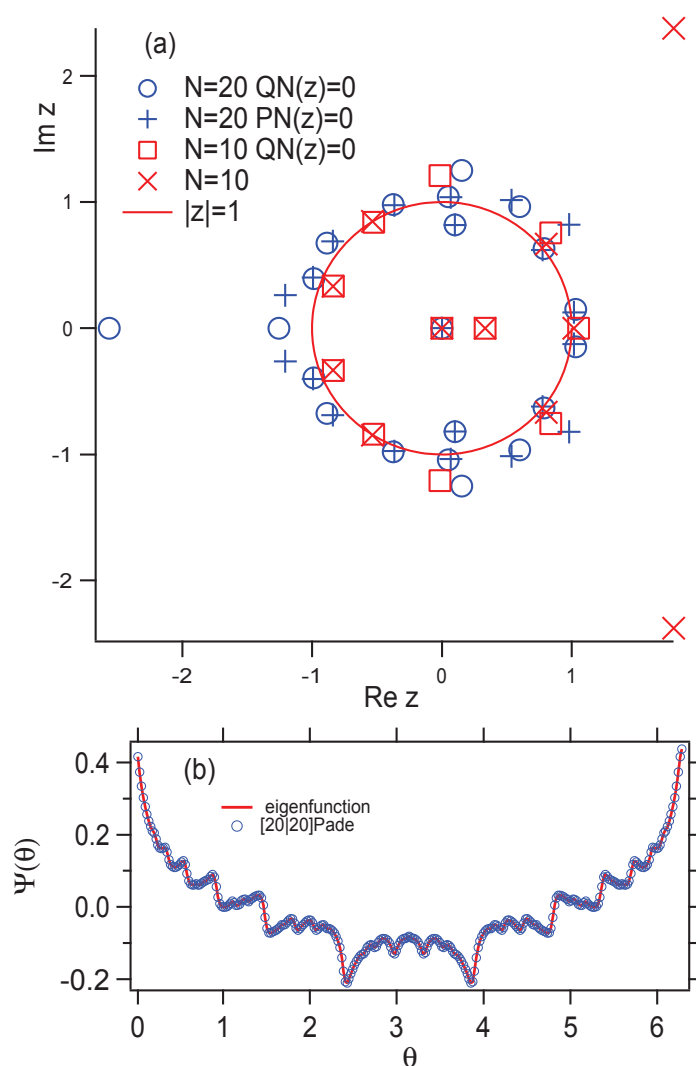


図 5: (Color online) (a) アンダーソン局在状態に対する [10|10], [20|20] パデ解析の極 (○, □) と零点 (+, ×) の分布。単位円 $|z| = 1$ を実線で示してある。(b) 実際に展開係数として使った固有関数部分と対応する [20|20] パデ解析による固有関数を偏角 θ に対して表示したもの。これは波動関数の一部を見ている。複雑な局在状態全体をパデ解析で見ることは困難。低エネルギーの固有状態はポール型特異性であろう。

そこで、この状況をより良く理解するために、簡単な考察をしておく。[N|N] パデ解析を考えればそれは常に

$$\frac{P(z)}{Q(z)} = \sum_i \frac{A_i}{z - z_i}, \quad (18)$$

の形に書ける。従って

$$z_i = e^{\gamma_i + i\omega_i}, \quad p_i = -\frac{A_i}{z_i}, \quad (19)$$

とおけば、

$$\sum_i \frac{A_i}{z - z_i} = -\sum_i \frac{A_i}{z_i(1 - z/z_i)} \quad (20)$$

$$= -\sum_i \frac{A_i(1 + (z/z_i) + (z/z_i)^2 + \dots)}{z_i} \quad (21)$$

$$= -\sum_k \sum_i \frac{A_i}{z_i z_i^k} z^k \quad (22)$$

$$= \sum_k c_k z^k, \quad (23)$$

ここで、

$$c_k = \sum_i p_i e^{-k(\gamma_i + i\omega_i)}, \quad (24)$$

である。したがって、パデ解析とは関数を指数関数的に落ちる合成振動で近似しようというものであると解釈できる。[1] で議論した Steinhaus の定理を始め、 c_k が有界でランダムに変動する場合は $\sum_k c_k z^k$ は自然境界をもつという数学的定理が存在するが、上記のことに基づいて解釈すれば次のようになる。もし c_k が有界な乱数ならば、その収束半径の1つまり $\gamma_k = 0$ を基準にして、全ての係数としての乱数 c_k に ω_i を割り振ろうとすれば無限個の ω_i が必要になりそれは収束半径1の単位円上に稠密に分布し、自然境界を形成する。アンダーソン局在の波動関数ならば、その指数関数的減衰率 γ は局在の Lyapunov 数 (局在長の逆数) に等しく波動関数は $e^{-\gamma}$ で揺らぎながら落ち、その局在状態の振幅の揺らぎは、数値的にマルチフラクタル構造を持つことも知られている。もしそうであるならば、 A_k を表現しようとするならばこの場合も無限個の ω_i が必要になり対応する極 $z_i = e^{\gamma + i\omega_i}$ は半径 e^γ の円周上を稠密に埋める事が期待される。しかし、それは仮にパデ解析がうまく機能したとしても $N \rightarrow \infty$ の極限で得られる結果であり、高々数十の項数で稠密さを判定するのはなかなか困難である。上でも記したようにランダムに変動する係数を持つ級数は自然境界をもつという数学的定理から、 V_n をランダム係数とする冪級数 $f(z) = \sum_n V_n z^n$ (ポテンシャル母関数) やフーリエ級数 $f(\theta) = \sum_n V_n e^{i\theta n}$ は自然境界を持つ事になる。ポテンシャル母関数の特異性がシュレーディンガー方程式の固有関数に伝播した結果、Anderson 局在の固有関数が自然境界を持つと考えるのがむしろ「自然」であろう。この点に関しては5節、6節で再び議論する。

次節においては目先を変えて、いきなり図5(a)のような複雑なアンダーソン局在の固有状態を調べることはやめ、固有状態の性質がある程度明確なハーパーモデルの局在状態の特異性を、診断することにする。実際、2節で示したようにハーパーモデルと力学系のKAMトーラス解との間の対応も心強い見通しを与えてくれている。

4 ハーパーモデルの量子状態

シュレーディンガー方程式 (10) において、 $V_n = V \cos(2\pi\alpha n)$ とした Harper モデルを例として、その固有関数の解析性を、パデ解析により診断することにする。このモデルの物理的起源も含めて、付録 C にハーパーモデルの基本的性質についてまとめてある。図 6(a) に Harper モデルの $V = 1.2$ に対するいくつかの (局在) 固有状態を示す。全て、同じ局在長も持ち指数関数的に局在している。図 6(b) は、いくつかのポテンシャル強度 V に対するハーパーモデルの基底状態を示している。振幅のピークが真ん中にありノードを持たない対称な固有状態である。以下の数値計算では、煩わしさを避けるため、この $V = 1.2$ の基底状態のみを扱う。

4.1 ハーパーモデルの局在固有状態と解析性

3 節でも示したように、 p - 表示に対して解析性を議論する。図 7 に N を三段階変えて、量子状態 $u(n)$ の離散フーリエ級数展開 $\Psi(p)$ の様子を示す。少なくとも数値的には $N \rightarrow \infty$ において、 $\Psi(p)$ が連続関数に漸近することがわかる。

そこで、 $\Psi(p)$ を $p \rightarrow p + iq (\equiv z)$ と虚数軸方向に解析接続し、 $\Psi_+(z)$ から生じる解析性をパデ解析で診断することも前節と同様であるが、もうひとつ工夫をする。 $V > 1$ の場合、固有関数の局在長は $\xi = 1/\log V$ で与えられる。そこで、次のようにこの局在長部分をスケールした固有状態 $s(n)$ をつくる。

$$u(n) = s(n)e^{-|n|/\xi}, \quad (25)$$

この $\{s(n)\}$ を係数として用い、指数関数的減衰というトレンドを除去した波動関数の解析性に対し、「本質的ゆらぎ部分」を抜き出した $\Psi(z)$ の解析性をパデ解析で診断する。これにより桁違いに小さな係数の存在から来る困難を除去することができる。図 8 は、いくつかのポテンシャル強度 V に対するハーパーモデルの基底状態を局在長でスケールして表示したものである。局在長でスケールすることにより、局在基底状態の振幅が $V = 1$ の臨界状態のものとはよく重なることがわかる¹³。

$\Psi_+(z)$ において、指数関数的局在をする固有関数の因子 $e^{-|n|/\xi}$ は収束因子として働き、リヤプノフ指数 (局在長の逆数) は、 $\Psi_+(p)$ の正の虚軸方向への解析的領域の深さを示していることがわかる。

$$\Psi_+(p) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N_R} e^{-ipn} u_+(n) \quad (26)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=0}^{N_R} s_+(n) e^{-ipn} e^{-|n|/\xi}. \quad (27)$$

¹³Ketoja らは類似のアイデアにより、ハーパーモデルのスケールした固有状態の従う方程式、

$$e^{-\gamma} s(n+1) + V_n s(n) + e^{\gamma} s(n-1) = E s(n),$$

の固有状態の揺らぎの性質を直接調べている [31, 32, 33]。ここで、 $\gamma = 1/\xi$ である。

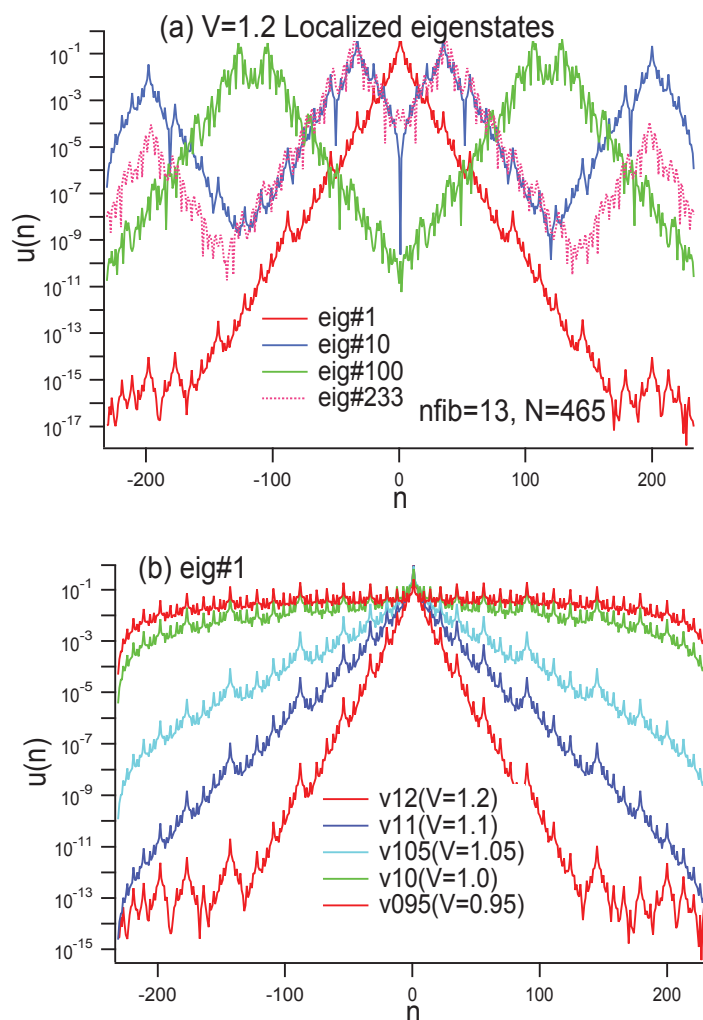


図 6: (Color online) (a) ハーパーモデルの $V = 1.2$ の場合におけるいくつかの (局在) 固有状態. $\text{eig}\#$ は固有状態の番号. $\text{eig}\#1$ は基底状態. 偶数個のサイト数で、対称なポテンシャル系を使っているため、中心に対し対称と反対称となる局在状態がある. (b) いくつかのポテンシャル強度 V に対する Harper モデルの基底状態. 縦軸は対数スケール. ここでパデ解析に使う係数は百程度なので、このシステムサイズでこの数値的精度で十分である.

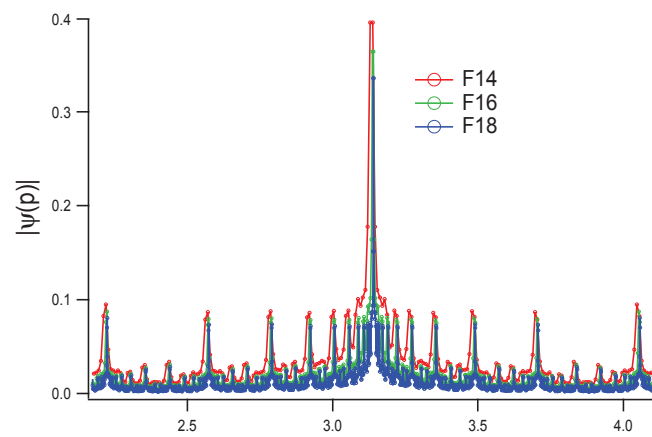


図 7: Harper の固有状態の離散フーリエ級数展開 $|\Psi(p)|$ を N を三段階変えての様子.

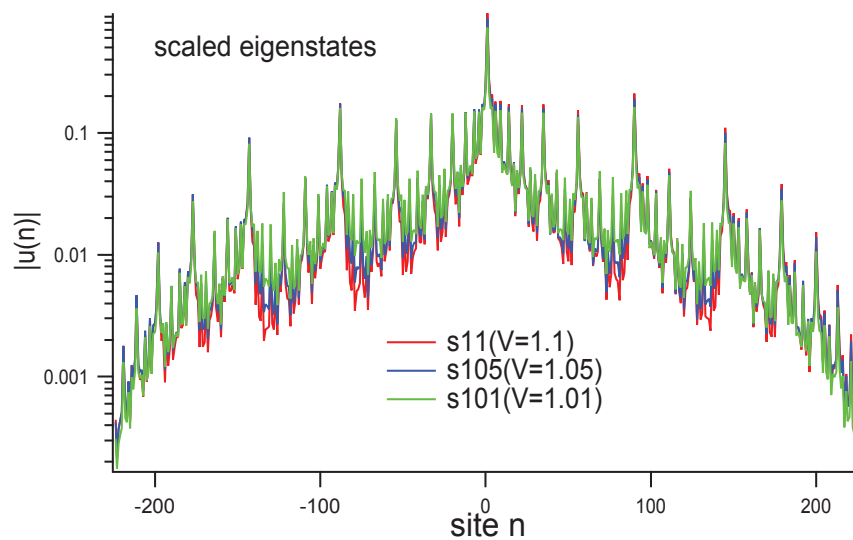


図 8: (Color online) 局在長 $\xi = 1/\log V$ でスケールした局在ハーパーモデルの固有状態。

図 9 は、 $[28|28],[45|45],[60|60]$ パデ解析の極と零点の分布を示す。極は単位円 $|z| = 1$ 周辺に集まっている。図 10 は極と零点の分布の一部を拡大したものである。単位円内部 $|z| < 1$ における極は零点と完全にキャンセルする。単位円 $|z| = 1$ に近い極ほど零点とキャンセルしないという傾向がある。また、この局在長でスケールした場合の極と零点の分布の結果は、ハーパーモデルの臨界状態 ($V = 1$) での結果と殆ど同じである。

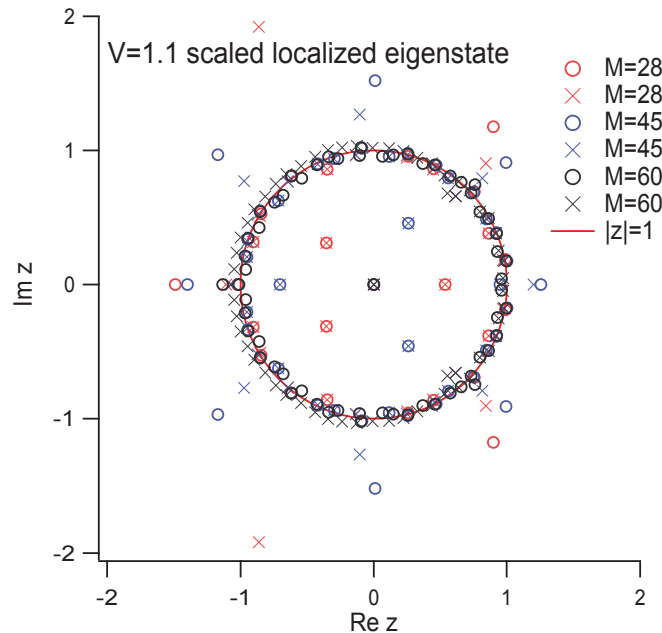


図 9: (Color online) 局在ハーパーモデル ($V = 1.1$) の基底状態にたいする $[28|28],[45|45],[60|60]$ パデ解析の極 (○) と零点 (×) の分布。係数はスケールしたものをを用いている。実線は単位円を表す。

さらに、パデ解析の正しさを確認するために、図 11 に θ -表示でパデ解析関数と元の $\Psi_+(p) = \Psi_+(re^{i\theta}) \equiv \Psi(\theta)$ を表示したものである。図 12 は、図 11 の拡大図である。図に示した単位円 $|z| = 1$ ($r = 1$) の場合においてすら、多少のズレを除いて、フラクタル状の複雑なピーク構造まで、比較的よく一致している。また、図 11(b) の収束因子を $r = 0.98$ とした場合 (単位円のやや内側をみることに相当) をみると、ピークの鋭さはなまされるが、両者の一致の度合いは格段に良くなることもわかる。(より大きな peak をうまく近似するために、僅かに元のハーパーモデルの局在状態に無い peak がパデ近似の結果に出ている。)

以上の結果は、ハーパーモデルの局在状態、中でも基底状態の固有関数は自然境界を持つことを示唆しているものと解釈できる。

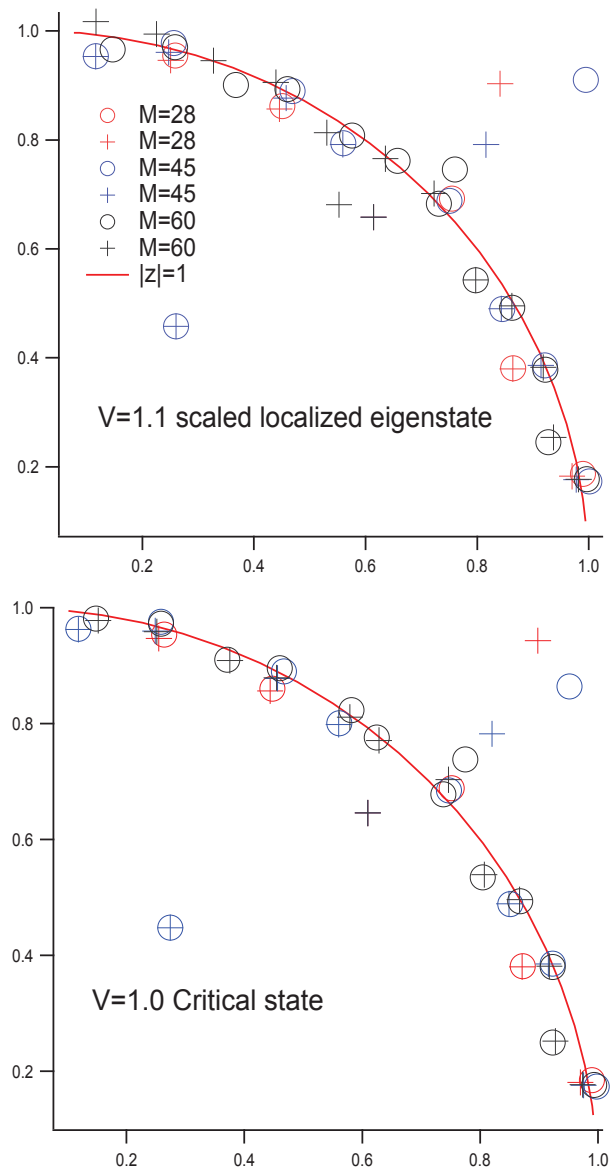


図 10: (Color online) (a) 図9の拡大図。(b) 臨界ハーパーモデル ($V = 1.0$) に対するパデ解析の極と零点の分布。実線は単位円を表す。

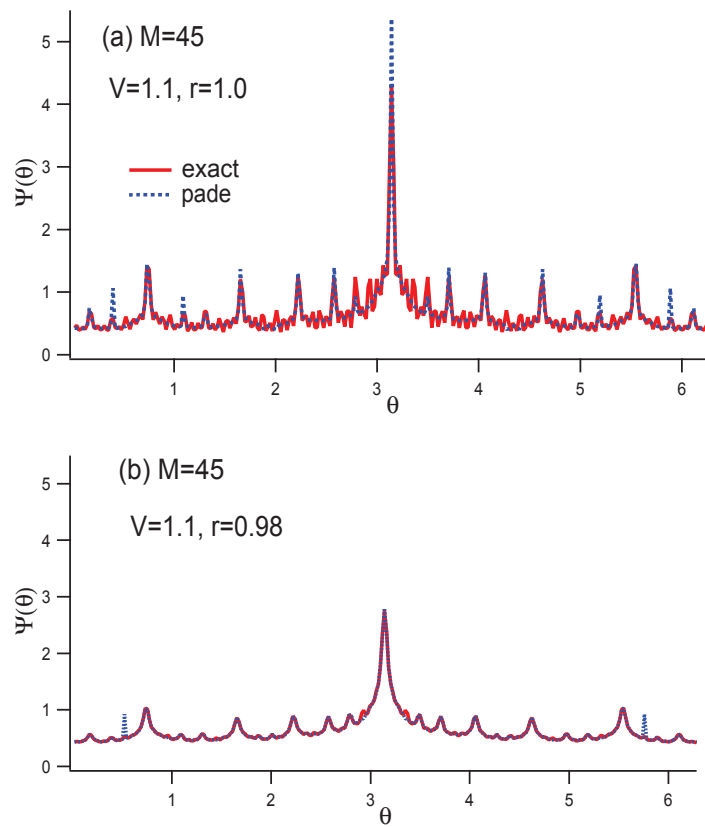


図 11: (Color online) 実際の局在ハーパーモデル ($V = 1.1$) の基底状態と $[45|45]$ パデ解析での状態の θ -表示 $\Psi(\theta)$ 。収束因子は (a) $r = 1.0$, (b) $r = 0.98$ 。

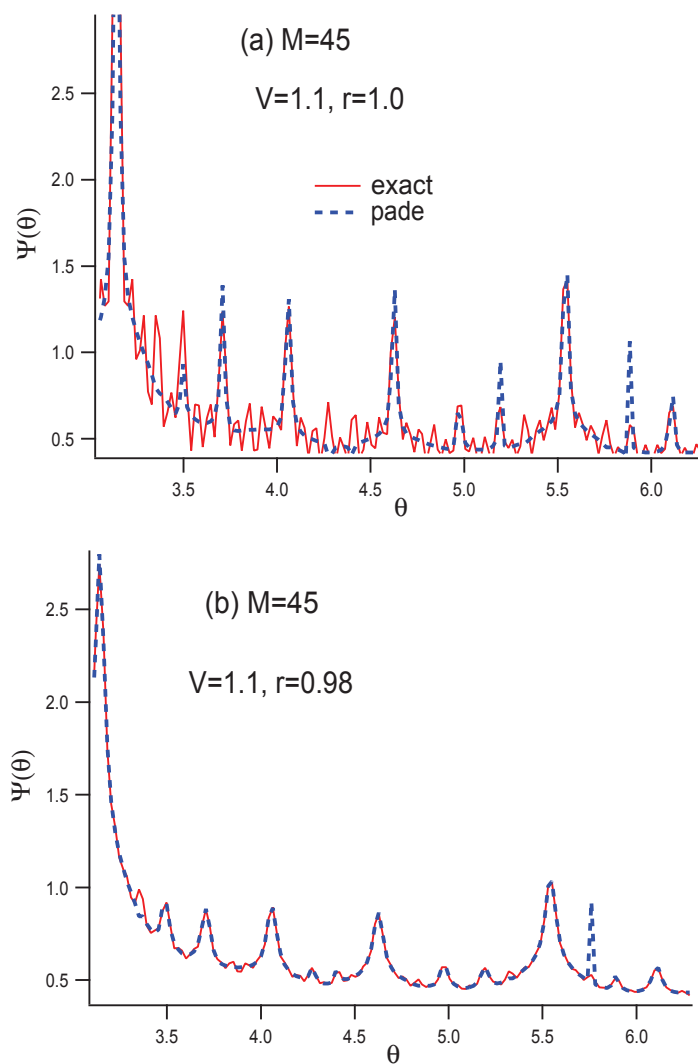


図 12: (Color online) 図 11 の拡大図 (a) $r = 1.0$, (b) $r = 0.98$.

4.2 多中心展開による自然境界診断: Direct method

最後に、より原始的なアイデアを用いて、前節のハーパーモデルの局在状態が $|z| = 1$ を自然境界に持つというパデ解析による診断結果を補強する¹⁴。

まず方法を紹介しよう。関数 $F(z)$ の中心 $z = 0$ 周りでの展開、

$$F(z) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n \quad (28)$$

を考え、収束半径が $R_c = 1$ であるとする。このとき、 $|z| = 1$ が自然境界となるか否かを判定する素朴な方法として、冪級数の展開中心を $|z| = 1$ の近傍 $w = re^{i\phi}$ に移動させ、収束半径を改めて評価することを考える。ここで、 $r = 1 - \epsilon$ において ϵ は収束領域の境界 $|z| = 1$ から新展開中心までの距離を表し正の小さな数とする、また ϕ は新展開中心の偏角である。収束半径内 $|z| < 1$ における新たな展開中心 $\omega = (1 - \epsilon)e^{i\phi}$ でのこの関数の展開は、

$$F(z) = \sum_{m=0}^{\infty} b_m (z - \omega)^m \quad (29)$$

とあらわされる。新たなべき級数展開の係数 b_m は

$$b_m \equiv \frac{F^{(m)}(\omega)}{m!} \quad (30)$$

$$= \frac{1}{m!} \sum_{n=m}^{\infty} n(n-1)\dots(n-m+1)\omega^{n-m} a_n \quad (31)$$

$$= \sum_{n=m}^{\infty} F_{mn} \quad (32)$$

という対応から原点周りの展開係数 a_n を用いて決定できる。 $F^{(m)}(\omega) \equiv \frac{d^m}{dz^m} F(\omega)$ である。新たな展開係数 b_n による $F(z)$ の収束半径は、

$$R(\omega) = \lim_{m \rightarrow \infty} \frac{1}{|b_m|^{1/m}} \quad (33)$$

により決定される。従って、任意の偏角 ϕ でその収束半径が $R(\omega) = \epsilon$ となれば、単位円 $|z| = 1$ が関数 $F(z)$ の自然境界であると推定できる。(図 13 を参照。)

理想的には (32) の和で N は無限大にとることが望ましいが、実際問題としてはどの程度まで N とればよいか評価してみる。まず、 $n \gg m$ とし $|a_n| \sim 1$ であるから、評価すべき、 $F_{mn} = n(n-1)\dots(n-m+1)\omega^{n-m} a_n / m!$ の n 依存性は

$$|F_{mn}| \propto \frac{n^n}{(n-m)^{n-m}} |\omega|^n a_n \quad (34)$$

により決まる。これは、 $|\omega| < 1$ より、 n の増加関数と減少関数の積である。従って、極値 n_0 周辺はガウス関数で近似できる。

$$F_{mn} \sim \exp\left\{-\frac{(n-n_0)^2}{2\delta n^2}\right\} (1-\epsilon)^n e^{in\phi} a_n \quad (35)$$

¹⁴ こういったアイデアは、[I] における空隙定理の原始的証明と直観的に結びつく。

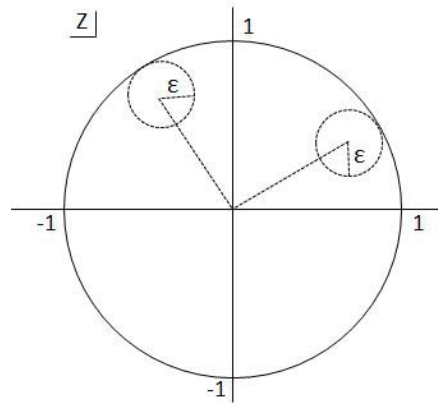


図 13: (Color online) 多中心展開による $|z| = 1$ 自然境界判別のアイデア

ここで、

$$n_0 \sim \frac{m}{\epsilon}, \quad \delta n^2 \sim \frac{m}{\epsilon^2}, \quad (36)$$

である。したがって、係数 $\{b_m\}$ の計算には $N \sim 2n_0$ 程度の係数 a_n を用いればよく、 m が大きく、 ϵ が小さいほど多く必要になる¹⁵。原理的には、任意の小さな ϵ で、全ての偏角 ϕ に対し収束半径が ϵ に収束することを示すことにより、 $|z| = 1$ が自然境界であることを示唆することになる。また、

$$\sum_{m=n}^N F_{mn} \sim e^{-\frac{m\phi^2}{2\epsilon^2}}, \quad (37)$$

より、 m が大きく、 ϵ が小さいほど数値的にこの和を求め、 $R(\omega)$ を得ることが困難になることにも注意が必要である。

実際に、ハーパーモデルの局在状態に対して、Lyapunov 指数でスケールした状態を係数として用い、 $\epsilon = 0.2, 0.1$ とした多中心展開により、 $|z| = 1$ の特異性評価を試みた。 $|z| = 1$ が自然境界であるならば、半径 0.8, 0.9 の円周上の任意の偏角の点から $|z| = 1$ に接する点が極となるので、収束半径 $R(\omega) = 1$ となるはずである。実際、半径 $r = 0.9$ の円周上の適当ないくつかの偏角 ϕ に対し、点 $\omega = r e^{i\phi}$ まわりの級数展開収束半径 $R(m)$ がほぼ 0.2 及び 0.1 付近に収束する様子を図 14 に確認することができる。従って、この結果もハーパーモデルのスケールした局在状態に対して、 $|z| = 1$ が自然境界であることを示唆しているものといえる。

5 ここまでのまとめと考察：局在量子状態と特異性

前節において我々が調べたものは、一番調べやすく、自然境界を持つ可能性が高いと期待されるハーパーモデルの高々ひとつの局在状態でしかない。しかし、ハーパーモデルに

¹⁵ 実際、準標準写像や標準写像の規格化された係数に対してこの方法を適用した場合、満足のいく結果を与えることも確認済みである。

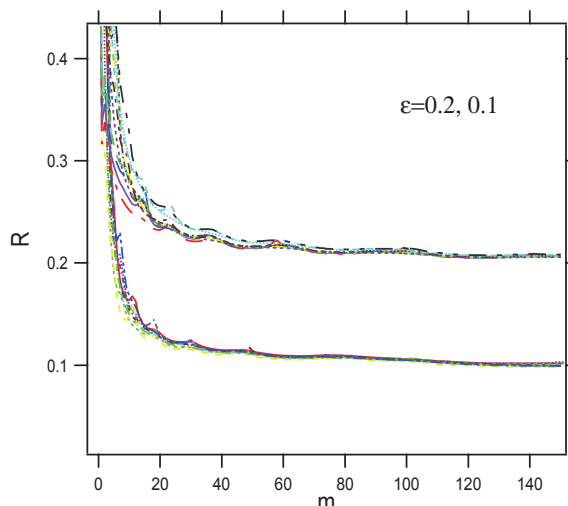


図 14: (Color online) ハーパーモデルのスケールした局在状態 ($V = 1.02$) に対して、 $\epsilon = 0.2, 0.1$ として多中心展開により、収束半径 $R(m)$ を見積もったもの。図はいくつかの偏角 ϕ に対して、評価した $R(m)$ を m の関数として表示してある。

固有な次の事情があることに注意しよう。

(a) ハーパーモデルの局在状態は、ポテンシャル強度が同じならエネルギーが異なっても全ての局在長は等しい。(b) ポテンシャル強度が異なっても、局在長でスケールした状態は臨界状態 ($V = 1$) と酷似していた。おまけに、(c) ハーパーモデルはポテンシャル強度に関する双対性 (Aubry duality) をもつ、すなわち $V > 1$ でいえることは表示を変えれば $V < 1$ に対応させられる。(d) この論文で調べたものは局在固有状態の一部を取り出した有限個の振幅でしかないが、スケールした局在状態の振幅は臨界状態のものに重なるとすれば、同様な局在状態の揺らぎ構造は $N \rightarrow \infty$ でも存在すると期待できる。

これらのことから、「ハーパーモデルの波動関数は自然境界をもつ」と推測できる。これが成立すれば、より一般化して、準周期系や準結晶の固有関数は自然境界を持つということに繋がることも期待できるが、どうであろうか。また、2節の注意はハーパーモデルについても当てはまる。ハーパーモデルの連続極限は、マシユ方程式になる [34]。この場合、マシユ方程式は周期ポテンシャルをもつ定常状態のシュレーディンガー方程式であるので、Bloch 解をもち、マシユ関数で表現できる。マシユ関数は整関数であるので、連続極限を考えるとハーパーモデルの特異性は spurious pair として消えていくものに分かれると考えられる。

また、一般にアンダーソン局在固有関数はサンプル平均しない場合、局在ハーパーモデルの場合同様、局在長の内側と外側においてマルチフラクタル的揺らぎがあるという数値データが知られている [18]¹⁶。この場合も指数関数的減衰を取り除いたゆらぎは、システ

¹⁶一次元ランダム系の透過係数で、局在長に相当する指数関数的減衰部分を取り除いた空間変動が非定常

ムサイズが無限大になっても統計的にマルチフラクタル的なものであり、(あるいは、これがランダムであってもよいが)、これを係数として使った関数、すなわち、 p -表示の固有関数は自然境界をもつという推測ができる。(パデ解析では十分に確認はできなかったが。)しかし、システムサイズ無限大の極限 $N \rightarrow \infty$ で、ランダム系の殆ど部分を示す振幅は、数値的には指数関数的減衰部分に埋没しているゆらぎである。様々な好条件が重なったハーパーモデルの場合と異なり、一般的な証明はより困難かもしれない。

パデ解析による数値計算や論理的考察から予想される一次元強結合モデルの固有状態の特異性に関するまとめは表1のようになる。

表 1: モデルと固有状態の特異性に関する予想

モデル	固有関数 (性質)	特異性
周期系	格子周期のブロッホ関数	極?
不純物系	不純物局在状態	極
ランダム系	局在状態 (ランダム揺らぎ)	自然境界
ハーパー局在 ($V_i=1$)	局在状態 (マルチフラクタル)	自然境界

アンダーソン局在状態やハーパーモデルの局在状態が複素変数空間で自然境界をもつことに対する我々物理的解釈は最後に議論する事にして以下では固有関数を規定するポテンシャルの解析性そのものに関して最近解明されつつある興味深い数学的事実を解説する。ポテンシャル V_n の解析性とは、正確に言えば級数展開表示の関数

$$V(z) = \sum V_n z^n \quad (38)$$

の解析性のことである。これは、離散系のポテンシャル V_n の Z 変換そのものであり、以下では**ポテンシャル母関数**と呼ぶことにする。付録Bに与えたような、Szegőの定理や次節で与える Breuer-Simon の定理から推測すると、 V_n が周期的な場合はポテンシャル母関数 $V(z)$ は特異性として極をもち、 V_n がランダムな場合、 $V(z)$ は自然境界をもつといえる。非常に荒い予想であるが、少なくともポテンシャル関数が自然境界を持つならば、それが伝播し固有関数も自然境界を持つことが考えられる。固有関数が特異的であるという我々の主張とポテンシャルの特異性はどう相関するのだろうか？

6 スペクトル特性とポテンシャル母関数の解析性

一次元強結合モデルや離散型のシュレーディンガー方程式においては、ポテンシャル(またはポテンシャル母関数)の性質はこれらの作用素のスペクトルや固有関数の局在・非局在性に直接関連する。2節や5節でも触れたが、局在・非局在転移が波動関数の解析的であることも報告されている [35]。

性の破れとどのように関連付けられるであろうか、興味深い問題である。本節ではパデ解析を離れて、ポテンシャルの性質、スペクトルの性質、固有関数の特異性、という3者の関係について最新の数学的知見を踏まえて考察する¹⁷。アンダーソン局在に関しては、源論文のほか、解説[22]に加えて文献[42, 39, 41, 40]なども参照されたい。

6.1 一次元系における数学的局在・非局在

この節と付録では一次元系格子系(一次元離散系)の局在・非局在問題に話題を限定し数学的な議論をする。そのシュレディンガー演算子は

$$L(q)u(x) = -\Delta u(x) + q(x)u(x), \quad (39)$$

で表されるが、その固有値分布(スペクトル)の特異性について論ずる。(スペクトルの特異性に関する数学理論は離散系も連続系と同じ取り扱いで同様の結果が示されているが、本稿では離散系のみ取り扱うことにする。)

まず、一次元離散系における局在・非局在転移について数学的に知られている結果を整理しておく。この論文で用いた一次元強結合モデル、

$$Hu(n) = u(n+1) + u(n-1) + V_n u(n), \quad (40)$$

に則して、改めて局在の定義をしておく。物理では、多くの場合、 $n=0$ から $n=\infty$ の半無限系を使うが数学的には $n=-\infty$ から $n=\infty$ の両無限系の方が取り扱い易いようである¹⁸。ここでは、必要に応じて使い分けることにする。

両無限系を想定しシステムサイズを無限大として、規格化可能な固有関数をもつならば、局在状態という。規格化可能な離散系の固有関数の振幅を $\{u_n\}$ とすると、 $\sum_n |u_n|^2 < \infty$ であればいいので、固有関数の裾野が遠方で $|u_n| \sim 1/\sqrt{|n|}$ より早く減衰すれば、局在状態である。一方、規格化不可能、すなわち、 $\sum_n |u_n|^2 \rightarrow \infty$ ならば、広がった状態という。(これらは、半無限系であっても同様に成立する。)一般的に物理の局在・非局在研究で良く用いられるグリーン関数、リャプノフ数などの関係は付録Eに与えてある。

V_n が周期的な場合、式(40)のエネルギースペクトルは絶対連続で、固有状態はよく知られたBloch状態(extended状態の一つ)である。逆に、 V_n がランダムな場合(ランダム系)では、確率1で点スペクトル(Σ_{pp})を持ち固有関数は指数関数的に局在することが数学的にも厳密に証明されている。4節で使ったHarperモデルの場合は、ポテンシャル強度 V を変化させることにより、スペクトルの性質を点スペクトルから絶対連続スペクトル(Σ_{ac})に変わり、 $V=1$ (臨界状態)で局在・非局在転移が生じる。(付録E及び付録Fを参照のこと。)連続系も含めて一次元のランダムシュレディンガー演算子においては、確率1で全ての固有関数が指数関数的に局在することが示されている¹⁹。むろん、定

¹⁷固有関数の局在・非局在はもちろん、特異性の表現は固有関数の表示の仕方に依存する。

¹⁸実際、半無限系での絶対連続スペクトルの証明などは両無限系での証明の後に出てきている。また、離散系で V_n が有限個の値を取る場合(例えば、-1 or 1のBernoulli系)の証明の方が、難しいようである。次節を参照のこと。

¹⁹電場がある系ではベキ局在が示されている。

義より、一般的には”ベキ関数的に局在”した状態も存在可能である。スペクトルに絶対連続部分が存在しないときを「弱い局在」、スペクトルが点スペクトルのみからなる場合を「強い局在」という。代表的な定理 [43] は

G – M – P 定理 (1977) : 弱い局在化のための必要十分条件は、エネルギー軸上殆どいたるところで、リャプノフ指数 $\gamma(E)$ が正であることである。

一次元系における局在はどのような一般的条件のもとで非局在化するのでしょうか。この問題に関しては、1982年に小谷によって提唱された数学理論（小谷理論）とそれを拡張したものが最も強力である²⁰。小谷理論によれば弱い局在のためにランダム系のポテンシャルに課される条件として、定常的である事（ポテンシャル列が統計的にみて位置のずらしに対し不変的である事）、エルゴード的である事（一つのサンプルでみたポテンシャルの統計的性質がサンプル集団でみた統計的性質と一致する事）、可積分性（アンサンブル平均が有界）をあげることができる。この条件に加えて弱い局在のための次の定理がある [44, 45]。

定理 (小谷 1982) : 一次元シュレーディンガー作用素において、ポテンシャルが定常エルゴード的で有界であることに加えて、非決定的であれば、絶対連続スペクトルは不在（弱い局在）である。

これは、ポテンシャル列がランダムな場合などの通常想定するマルコフ性などの条件よりずっと「弱い条件」で局在が起き、少なくとも弱局在が極めて一般的現象である事を示唆する。ここで、小谷の意味での非決定的であることは、「ポテンシャルが左半直線で決まっても（ポテンシャルを定める規則に従って）右半直線は決まらないということであり、ポテンシャルが有限の（多くの）値を取るとき、ポテンシャルは非決定的である」ということである。逆に、

定理 (小谷 1982) : 絶対連続スペクトルが存在するならば、ポテンシャル列の半直線で決まれば全体決まるという点において決定的である。

「非決定性」などの正確な条件に関する記述は付録Fを参照されたい。さらに、逆問題として、次の予想がある [46, 47]。

小谷 – Last 予想 (1989, 1999) : 絶対連続スペクトルが不在 ($\Sigma_{ac} \neq \phi$) ならばポテンシャル列は概周期的である。

即ち、スペクトルが絶対連続成分を含むような系のポテンシャルのクラスは、概周期関数という非常に限られたクラスに絞られてしまうという予想である。

また、強い局在のために、絶対連続スペクトルの不在のほかに、例えば特異連続スペクトルの可能性を除かなくてはならず、実際どんな条件が必要なのかわかっていない。一

²⁰小谷理論では、初めポテンシャルの分布 $P(V)$ のサポートが連続分布の場合を仮定したが、後に Hölder 連続の場合に拡張された。

方、物理の分野では、ポテンシャルに課される条件として最も強い条件である定常性を破るようなランダムポテンシャル列を用いて非局在化を調べる研究がある。例えば、ポテンシャル列に各サイト独立同分布の完全なランダム列ではなく、非定常な揺らぎを持たせた場合の局在性、解析性を破るポテンシャルを用いた局在・非局在転移に関する研究などである。付録Fにそのようなポテンシャルの例を挙げてある。

6.2 絶対連続スペクトル不在とポテンシャル自然境界の「呼応」

ごく最近、Breuer と Simon により局在問題とポテンシャル母関数の自然境界との関係が掘り起こされてきている。彼らは、弱い局在の成立条件と冪級数関数が自然境界をもつための条件が同じであることに注目し、絶対連続スペクトル不在とポテンシャル母関数の自然境界という性質の間にあたかも「呼応」するかのように存在するいくつかの定理を示している。これらの定理を概観する。

半無限ヤコビ行列

$$J^{(\infty)} = \begin{pmatrix} b_0 & a_0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ a_0 & b_1 & a_1 & 0 & \dots & \dots \\ 0 & a_1 & b_2 & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & a_n & \dots \\ 0 & 0 & \dots & a_n & b_n & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \equiv \{b_n, a_n\}_{n=0}^{\infty} \quad (41)$$

なるものを導入しておく。 $a_n = 1$, $b_n = V_n$ としたものが、離散型シュレーディンガー演算子や強結合モデルに対応する。

まず、定常エルゴード過程としてのポテンシャル列の非決定性という非常に弱い条件で、固有値問題における絶対連続スペクトルの不在を示した前節の小谷理論の条件と全く同じ条件のもとで、次の定理が成立する [21]。

Breuer – Simon の定理 1(2011) : ポテンシャル列 $b_n(\omega)$ は定常、エルゴード的で、有界な非決定的過程とする。 $(\omega$ はサンプルを表す) このとき、殆ど全ての ω に対して、ベキ級数関数 $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n z^n$ は強い自然境界をもつ。

このことが示唆するのは、ポテンシャル列がある非常に弱い条件を満たせば、シュレーディンガー演算子やヤコビ行列のスペクトルに絶対連続スペクトルが存在しないという現象（弱い局在）とポテンシャル母関数（ポテンシャルの Z 変換）に特異性（自然境界）が存在するという現象が同時に起こる、あるいは2つの現象には強い相関が存在することである。

当然、格子点のポテンシャルの決定過程が確率過程を含むならば、左半直線のポテンシャルが決まったとて右半直線のポテンシャルは決まらず、非決定ポテンシャル列とい

うことにはなる。このときは、 $[I]$ で示したランダム級数に関する自然境界の存在を示す Steinhaus の定理が成立するが、ここでは「強い」自然境界であることに注意しよう。

一方、ハーパーモデルのようなポテンシャル列 $b_n = \cos(\alpha n)$ (α は無理数) の場合は非決定的ではない。しかし、この種の決定論的ポテンシャルにも不連続な跳びを導入すれば非決定なものが作れて弱局在を引き起こす可能性を示唆している。その代表例として次の定理 [?] がある²¹。

Damanik – Killip の定理 (2005) : $J^{(\infty)}$ が半無限ヤコビ行列とする。 $J^{(\infty)}$ が、 $a_n = 1, b_n(\theta) = g(\alpha n + \theta)$ で、 α は無理数、関数 $g(z)$ は周期 1 で有界 $g(z) \in [0, 1]$ とする。この関数が区分連続 (有限個の多くの点を除いて連続) で、不連続点のひとつで右極限と左極限が異なるとき、全ての θ に対して、 $J^{(\infty)}$ は絶対連続スペクトルをもたない。

このような現象がスペクトルで起きているとき、ポテンシャル母関数では次の定理で与えられる非常に特異的な現象が起きている [21]。

Breuer – Simon の定理 2 (2011) : 関数 $g(z)$ が Damanik-Killip の定理のものであるとき、全ての θ に対して、 $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} g(\alpha n + \theta) z^n$ は $|z| = 1$ に強い自然境界をもつ。

以上 2 つの例は局在現象に関するものである。すなわち、非局在現象 (少なくとも弱局在) を起こす十分条件のもとで、同時にポテンシャル母関数が自然境界をもつという現象がみられるということがわかる。

さらに、次に示すように、ベキ級数に関する Szego の定理に対しても対応するヤコビ行列のスペクトルに対する定理が小谷や Remling によって得られている [46]。(Szego の定理に関しては付録 B を参照。)

Kotani の定理 (1989) : エルゴード的な両無限ヤコビ行列 $J_{(\infty)}^{(\infty)}$ で、 a_n, b_n が有限集合の値をとるものとする。このとき、 $J_{(\infty)}^{(\infty)}$ は絶対連続スペクトル不在である、または、 a_n, b_n は周期的である。

これは、Remling により、半無限ヤコビ行列 $J^{(\infty)}$ に対して拡張された (2007)。Breuer と Simon は、Szego の定理や Kotani の定理に刺激されて、一連の「Breuer-Simon の定理」を作り上げていったようである。

逆に、スペクトルの性質やポテンシャル母関数の解析性がポテンシャル列 V_n の性質を規定するための条件となる次の定理も存在する [49]。ただし、付録 F に、スペクトル理論で使われる専門用語「ワイル関数」「無反射性」「右極限」などの説明を与えてある。

²¹Damanik-Killip の定理における「有限個で多くの不連続点を持つ」という条件は重要である。ハーパーモデルのような \cos 型のポテンシャルは、「有限で不連続点はない」。また、2 節の標準写像の量子版は運動量空間で局在現象を示す。これは量子 kicked rotor を \tan 型のポテンシャルをもつ強結合モデル (65) にマップすることにより解釈がなされている [56]。(これは、メリーランド変換と呼ばれる。具体的には付録 D を参照のこと。) この \tan 型ポテンシャルをもつ強結合モデルの場合も、「不連続点はあるが、発散をもっている」ので Breuer-Simon の定理がすぐに当てはまるとは言えない。

Remling の定理 (2011) : 半無限ヤコビ行列 $J^{(\infty)}$ がエネルギー軸上の領域 I で絶対連続スペクトルを持てば、全ての右極限 (両無限ヤコビ行列) は I 上で無反射である。

絶対連続スペクトル中のエネルギーのワイル関数は解析接続可能になり、物理的には片側方向に伝播する Bloch 様の非局在状態に対応する。このような無反射量子状態が存在するとき、対応するポテンシャル母関数では次のような現象が起きている。

Breuer – Simon の定理 3(2011) : $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n z^n$ が $\sup_n |b_n| < \infty$ を満たし、開区間 $I \subset \partial D$ の外側への解析接続をもつとする。このとき、任意の右極限 (両無限級数) は I 上で無反射である。ここで、 ∂D は解析領域 $D = \{z : |z| < 1\}$ の境界を表す。

系の固有関数が非局在的でスペクトルが絶対連続成分よりなる場合、対応するポテンシャル母関数からは自然境界が消えてしまう²²。

結局、象徴的に表現すれば、「非決定性 \Leftrightarrow 絶対連続スペクトル不在 \Leftrightarrow 自然境界」または、「無反射性 \Leftrightarrow 絶対連続スペクトル不在 \Leftrightarrow 自然境界」ということになる。ポテンシャル列に加えられたさまざまな条件いかんで「小谷理論」「Damanik- Killip の定理」「Kotani-Remling の定理」や「Remling の定理」に従ってシュレディンガー演算子の固有状態には局在 / 非局在現象が発生するが、それぞれに対応して、ポテンシャル母関数では対応する「Breuer-Simon の定理」や「Szegő の定理」が存在し、その解析性に特異 / 非特異現象が、換言すれば自然境界の有 / 無が発生している事が分かる。以上の諸事実はポテンシャル母関数の特異性と固有状態の局在の間に強い相関がある事を示唆する。ただし、それぞれの定理のなかでポテンシャル列に与えられる条件は十分条件であり、必要十分条件ではないことに注意しよう。実際、ポテンシャルが自然境界を持たなくても、ハーパーモデルのように局在は起こりうるのである。

7 まとめと課題

パデ解析を用いて簡単ではあるが複雑性を内包すると予想される量子状態、具体的には、一次元強結合モデルの、不純物状態、Anderson 局在状態、およびハーパーモデルの局在状態に対し、波動関数の特異性診断を行った。

不純物状態に対しては、その固有状態の特性が極よりの確に表現できた。アンダーソン局在状態、ハーパーモデルの固有関数は特異点が集積した自然境界もつ可能性が強い事を示唆した。さらに、これらの結果とは別に、べき級数が自然境界をもつことを示すいく

²²より正確に言えば、関数 $f(z)$ が

$$\sup_{0 < r < 1} \frac{1}{2\pi} \int_{e^{i\theta} \in I} |f(re^{i\theta})| d\theta < \infty, \quad (42)$$

を満たすし、開区間 I の近傍へ解析接続可能なとき、すなわち $f(z)$ の平均が有界な場合、という条件も要る。

つかの数学的定理に基づき、ランダム系やハーパーモデルの固有状態が自然境界をもつ可能性を議論した。

また、「ヤコビ行列のポテンシャルが非決定的である」ならば、「絶対連続スペクトル不在」と「そのポテンシャルを用いた冪級数関数が強い自然境界をもつ」などの対応が存在する。これらに基づき、前節までに用いた次元強結合モデルにおける局在・非局在の問題と自然境界との関係や、[1] でみてきたランダム級数の定理などから次のことが推察される。

予想:ランダムポテンシャル列の場合、ポテンシャル母関数は強い自然境界をもつ。それが変換されて、アンダーソン局在状態が自然境界を持つ可能性が予想される。しかし、ハーパーモデルの場合は、ポテンシャル列は余弦関数で作成されるため、ポテンシャル関数は整関数であり自然境界は持たない。そのため、ポテンシャル母関数の特異性が伝播して固有状態が自然境界をもつと、単純に結論することはできない。むしろこの論文で行ったパデ解析での特異性診断や固有関数の揺らぎの性質などから、ハーパーモデルの局在固有関数（臨界固有状態）が強い自然境界をもつことが示唆される。

最後にアンダーソン局在状態やハーパーモデルの局在状態が複素変数空間で自然境界をもつことの物理的意味を考えよう。ハーパーモデルで明らかにされたように、波動関数を複素空間に解析接続した時、その収束半径（局在長の逆数）、即ち自然境界上での固有関数の構造は局在・非局在を問わず臨界点近傍ではポテンシャル強度 V に依存しない。この事は、固有関数の解析性は構造安定で系の制御パラメータに鋭敏に依存せず、自然境界をもつことを期待させる。収束半径に接近するという操作は固有関数の指数関数減衰を除去する操作を表しているので、指数関数的減衰部分を増幅され概ね平坦にされた固有関数が、ポテンシャル強度によらない事を意味する。そして、臨界値 $V = 1$ になったとき、実軸自体が自然境界となり、そこでは局在運動が解けて、不可逆的な拡散運動が起きていると解釈できる。局在状態 ($V > 1$) では自然境界が実軸から複素空間に移行するだけで固有関数の特異構造が殆ど不変である事を考えると、複素空間でも実は不可逆的な拡散的運動がおきていても不思議ではない。即ちハーパーモデルは $V = 1$ の臨界状態でのみ不可逆的拡散運動をおこすわけではなく、実軸上で局在的に見えて、量子不可逆性が観測されない $V > 1$ においても、複素空間での運動は既に**不可逆の様相を備えている**と考えるべきなのかも知れない。更に大胆に言えば、局在状態は実は潜在的に拡散状態であると言ふべきなのかも知れない。局在が発生すると自然境界が発生し、そこでは運動は既に不可逆的である。自然境界が実軸に下りてくる事によって複素面に潜在した非可逆性が拡散という形で顕在化する。むしろこの事実を実証する作業は今後に残された課題である [36]。

さらに、もしこのシナリオを認めるならば、準周期ポテンシャルという特別なポテンシャルでなくランダムなポテンシャルの下で起きるアンダーソン局在現象でも同様の筋書きができていないと考えられないだろうか? 実際3節でみたように、局在ポテンシャルも自然境界をもつように見える。一方、波動関数に局在長内、外の区別があるわけではなく指

数関数的に減衰する部分もふくめてマルチフラクタルな構造を持つという数値計算の主張が90年代になされている。自然境界への接近が波動関数の指数減衰部分を除去する事を考えると、マルチフラクタル構造はまさに自然境界に於ける波動関数の特異性を表していると解釈できる。このような特異的に複雑な構造は多重散乱による干渉効果の累積によってもたらされている。上で論じたハーパーモデルで起きていることのアナロジーがここでも使えるならば、高次元不規則系や多自由度系で観察されている局在-非局在転移は自然境界の実軸への接近として理解できるだろう。局在系では自然境界の発生が普遍的で、それは構造安定、即ち系の制御パラメータの変化に対して安定であり、それが系を潜在的に不可逆的にしているという見方が成り立つと思われる。潜在的不可逆性をもたらす自然境界の実軸降下による顕在化が局在-非局在転移であるというシナリオである。次元の増大や多自由度との結合が自然境界の実軸降下をうながし、それらの系で見られる正常拡散現象や時間反転不可逆性などにみられる不可逆現象をもたらすと考えたいわけである。以上から次の仮説を立ててみよう。

仮説: 自然境界の発生に伴う波動関数の複雑化が量子不可逆現象の究極の起源である。すなわち、「自然な」量子状態は複素空間に自然境界(その外側に解析接続不可能な領域)をもち、領域の内部では干渉性を示す。しかし、「自然な」摂動により自然境界が実空間上(観測空間ともいえる)に接近し、複雑な量子状態が具現化する。これが「脱干渉化」であり、局在・非局在転移の現れである。

これを一歩進め、少し異なる方向から自然境界の果たす役割りを見てみよう。ハーパーモデルならばポテンシャルの準周期性が固有関数のマルチフラクタル的揺らぎを導き、ランダム系ならばポテンシャルのランダムさが固有関数の複雑な揺らぎを導くように、ポテンシャル母関数の性質は固有状態の特異性に直接結びつくと考えられる。前節で詳しく議論されたように、極めて弱い普遍的条件の下でポテンシャル母関数そのものが自然境界をもち、そのようなポテンシャル母関数の特異性と強く相関しつつ一次元量子系のスペクトルが(絶対連続スペクトル不在で)局在的な波動関数を持つ事が示唆される。この事実と上の仮説をあわせて更に大胆に妄想すれば、周期系のような極めて例外的な系の量子状態以外の「自然な」量子状態は一般に自然境界をもち、拡散的あるいは不可逆的振舞を潜在的に内包する量子状態であると考えられることができる。

本研究で探ってきた量子状態の解析性は、一見、数理的でテクニカルなことに見えるが、自然境界の存在を確認するためのものであった。[1]の冒頭でも記したが、少数自由度の量子系の運動の安定性は少なくともヒルベルト空間次元が有限である限り理論的に保証されている。その意味で、古典系が不安定化することに対応するような量子系の不安定性は実世界(観測世界)になかなか出現しない。しかし、普遍的現象である局在化現象を数学的に見ると、量子状態を実空間から複素空間に解析接続すると複素空間の自然境界という形で内包された不安定性が確かに存在していることがわかる。自然境界の内側の領域では量子系の安定性が保障されるが、自然境界の外側の領域において内側世界から予想

(解析接続) できない不安定性が生じているのである。この自然境界自体が複素空間から実軸上に接近したとき、内包されていた不安定性が観測空間に、非局在化という形で観測できるのである。非局在化がきっかけになって最終的に定常拡散という非可逆過程が生じる。以上の過程を統計力学の問題として読み替えれば、非局在化の発生は「くまなく可能な状態を渡りあるける」量子エルゴード性の発生に読み替えられ、可逆的世界がエントロピーの増大が自生する不可逆世界に転移する事を意味する。それは当然散逸の発生を帰着する。我々は、高々数自由度（実際は一次元系なので1自由度）の toy model、いやまさに toy model であるがゆえにかいま見る事ができる量子系における非可逆性発生の現場に立ち会いたいがために、このようなアプローチを行ったわけである。

本稿では局在状態のみを中心に解析性を診断した。その理由は KAM のカオス転移をハーパーモデルの局在・非局在転移になぞらえたとき、広がった状態は解析性の破れた状態に対応し取り扱いに困るからである。逆に言えば、局在状態は解析的なパラメータ領域内に存在し、解析接続が不可能な広がった状態に対応するパラメータ領域との間に自然境界が存在するであろうという妄想に基づき、局在状態を調べたわけである。

一次元アンダーソンモデルやハーパーモデルに関して、局在・非局在の条件を探索することに際して、数学的結果は強力であった。しかし、非定常ポテンシャル列の場合や高次相関のある非解析的ポテンシャルの場合の量子状態の局在性や非局在性はいまだによくわかっていない。さらに、局在・非局在転移に伴う量子状態の特異性の変化については、ほとんど何もわかっていない。

本稿では主に固有状態のみをしらべたが、今後は時間発展した量子波束の解析性も調べていく必要がある。特に、時間発展波動関数の局在・非局在転移（典型的には量子拡散）に対して、解析性の破れをしらべ、**不可逆を伴う波動関数の特性**を解析性という観点から明確にしていきたい [36]。このことについては、既に5節で考察したのでここでは繰り返さないことにする。なを、[1] 及び本稿の内容に関連する論文は現在準備中である [37, 38]。

最後に、江戸時代の八戸在住の思想家で医者でもあった安藤昌益による「自然真栄道」の一節を、冒頭で引用したことに関し付言しておこう。安藤は、「運動に世界の起源の全てがある」という徹底した運動一元論を唱え、現実の世界では二元を媒介にして起こるかに見えるにも拘らず、この二元は仮象でありそれが必然的に生み出す「陰陽」、「上下」、「尊卑」等の構造化や序列の発生を仮象として徹底的に批判した [65]。二元論的安定性に立脚する中国起源の思想を完膚なきまでに批判した自生の思想家といえる。自然とは「自り然スル」（ひとりなする）ものであり力動の根源的存在である。そして、その存在は日常のリアルな世界からは決して可視できない。しかし、それは全ての根源として、時至れば必ず我々の棲むリアルな世界に現象し、その時仮象は革まる。ひとりなする存在は、仮象の枠組みでしかモノ見えぬ我々の視線の彼方にあるが、その鼓動をカラダで感じそれに和する生き方は存在する。それは、他者との二元的（他者との優る / 劣るという順位を伴なう）関係でむすばれることではなく、自ら耕し自らを養う直耕者として、自然（ひとりなする）に根をもつ存在として生きる生き方にほかならない。なぜ本論文に安藤を引用し

たか、お分かりいただけよう。

A 力学系の共役関数の計算

ここでは、2節で準標準写像の場合に、共役関数の解析性をパデ解析で診断するため用いた計算を示す。関数方程式 (9) において、 $F(\theta) = \theta + G(\theta)/i$ とおき、 $x = Ke^{i\theta}$ に関し

$$G(\theta) = \sum_{n=1} b_n x^n \quad (43)$$

と展開する。これは、 $K < 1$ を収束因子としたフーリエ級数展開である。また、

$$\exp G(\theta) = \sum_{m=0} c_m x^m \quad (44)$$

と展開する。このとき、展開係数間には

$$nc_n = \sum_{m=1}^n mb_m c_{n-m}. \quad (45)$$

が成立している。また、関数方程式から次の展開係数を決定する漸化式を得る。

$$D_n b_n = \frac{1}{2} c_{n-1}, \quad D_n = 4 \sin^2 n\pi\alpha. \quad (46)$$

ここで $\omega = 2\pi\alpha$ とした。 $c_0 = 1$, $\alpha = (\sqrt{5} - 1)/2$ として、展開係数 b_n は指数関数的に増大するが、それを適当に修正して $B_n = r^n b_n \sim 1$ になるようにしてある。ここでのスケール因子 r は数値データから最小二乗法で決めている。すなわち、

$$G(x) = \sum_{n=1} b_n x^n = \sum_{n=1} B_n (x/r)^n = \sum_{n=1} B_n (K/r)^n e^{i\theta n}, \quad (47)$$

の収束半径は、 x/r を変数と見なすと $|x/r| \simeq 1$ になるように調節した。また、ハーパーモデルの固有状態に対応するのは作用関数 θ で微分したものの、

$$\frac{dG(\theta)}{d\theta} = i \sum_{n=1}^{\infty} n B_n (K/r)^n e^{i\theta n}, \quad (48)$$

である。係数列 $\{nB_n\}$ が図 8(a) に plot してある。この係数列 $\{nB_n\}$ に対し Pade 近似を行い、pole の位置を示したものが、図 8(b) である。

さらに、標準写像の場合にも、全ての Diophantine 数 ω (有理数から遠いもの) に対し、共役関数に関するパデ解析の極分布が $|K/K_c| = 1$ の単位円になることや、 ω が有理数 (p/q) に近いとき、 $(-1)^{2q}$ の根に対応した $2q$ 個の line がはいることや、 ω を complexify (散逸を入れることに対応) した場合の特異性などが調べられている。

B ベキ級数関数の自然境界に関する定理

ここでは、6節に関連する係数列が有界でランダムでない場合のいくつかの定理を記す。詳細は、文献[50, 51]を参照されたい。

Szego の定理 (1930) : 収束半径 1 の幂級数 $f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n z^n$ において、 b_n は有限集合上にある場合、

$$f_{Szego}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n z^n. \quad (49)$$

は $|z| = 1$ を自然境界に持つか、そうでなければ、 b_n が周期的で $f_{Szego}(z)$ は $|z| = 1$ 上に極をもつ有理関数である。

証明は文献[51]を見られたい。

「Breuer-Simon の定理 2」は有名な Hecke の定理を含む。

Hecke の定理 (1921) :

$$f_{Hecke1}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} [\alpha n] z^n. \quad (50)$$

$$f_{Hecke2}(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \{\alpha n\} z^n. \quad (51)$$

は無理数 α に対して、 $|z| = 1$ を自然境界に持つ。 $[x]$ は x の整数部分の値を表し、 $\{x\} = x - [x]$ は x の小数部分の値を表す。

次の定理も存在する。

Polya – Carlson の定理 (1921) : $\sum_{n=0}^{\infty} a_n z^n$ において、もし a_n が全て整数で収束半径が 1 なら、は有理関数か、もしくは収束円上が自然境界になる。

C ハーパーモデル

ハーパーモデルは、一次元準周期系の典型的モデルであるが、面に垂直に一様磁場がかげられた二次元正方格子からなる強結合モデルにおけるブロッホ電子のモデルでもある[8, 52]。例えば、ベクトルポテンシャルに対してランダウゲージを採用すれば一体波動関数は、ハーパーモデル（離散 Mathieu 方程式といわれることもある）に従うことが導ける。このとき、無理数 $\alpha = \Phi/\Phi_0, \Phi_0 \equiv hc/2e$ であり単位格子を貫く磁束と磁束量子の比

とし、この二次元系の波動関数を、 $\Psi(n, m) \equiv \Psi(n)e^{ik_y m}$ とすれば、 $\Psi(n)$ の従う方程式が

$$\Psi(n+1) + \Psi(n-1) + V \cos(2\pi\alpha n + k_y)\Psi(n) = E\Psi(n) \quad (52)$$

とハーパーモデルとなる。パラメータを適当にスケールしてある。すなわち、ハーパーモデルのポテンシャルの初期位相 β は y 方向の運動量成分 k_y であり、実験的にもコンロールしやすいパラメータである。

ハーパーモデルの量子状態に関してよく知られている事実を挙げておく。式(52)で、ポテンシャル強度 V により、そのスペクトルや動的性質が変化する。 $0 < V < 1$ に対し、連続スペクトルをもち全ての固有関数は広がった状態になる。一方 $V > 1$ に対しては、点スペクトルをもち全ての固有関数は指数関数的に局在する。このとき全ての状態の局在長は $\xi = 1/\ln|V|$ である。このことは、このハーパー方程式が次のような逆格子空間への変換

$$\Phi(m) = \exp(i\beta m) \sum_{n=1}^N \exp\{i(2\pi\alpha m + \beta)n\} \Psi(n). \quad (53)$$

により不変 (Aubry self-duality) であることから直観的に理解できる。

$$2 \cos(2\pi\alpha m + \beta)\Phi(m) + V(\Phi(m+1) + \Phi(m-1)) = E\Phi(m). \quad (54)$$

他方、 $V = V_c = 1$ の場合は、特異連続スペクトルを持ち固有関数は臨界的な振る舞いをする。臨界的状態のマルチフラクタル的特徴は、繰り込み群の手法など様々な計算により示されている [53, 12, 54, 55]。数値計算では、有限のシステムサイズで、数値的にスペクトルや固有関数を調べる場合、無理数 α を次のように有理近似 (α が黄金比の場合は Fibonacci 近似)、

$$\alpha_k = \frac{F_k}{F_{k+1}}, \quad (55)$$

を用い、システムサイズを $N = F_{k+1}$ として、周期 F_{k+1} の周期系から Fibonacci 近似のオーダー k を上げていき無理数極限の状態を探ることができる。

一般に、エネルギースペクトルは初期位相 β に関する和で定義される。 $H(\alpha, V, \beta)$ をハミルトニアンとして、 $S(\alpha, V) = \cup_{\beta} \text{Spec}(H(\alpha, V, \beta))$ をスペクトルとすれば、次の関係を満たす。

$$S(\alpha, 2V) = VS(\alpha, \frac{2}{V}). \quad (56)$$

D メリーランド変換

Grepel らは次の kicked system

$$H(p, \theta) = \frac{1}{2}p_{\theta}^2 + V(\theta) \sum_r \delta(t - rT), \quad (57)$$

のフロケ演算子の（擬）固有値問題、

$$e^{-\frac{i}{\hbar}V(\theta)}e^{-\frac{iT}{\hbar}\frac{p_\theta^2}{2}}\psi(\theta) = e^{-\frac{iT}{\hbar}\epsilon}\psi(\theta), \quad (58)$$

を強結合模型という固有値問題に変換し、運動量空間での局在現象を考察した [56]。(メリーランド変換、または、メリーランド構築という。) ここで、 $\psi(\theta)$ と ϵ は、フロケ状態と擬固有値である。キック前後の平均値 $\Phi(\theta)$ は

$$\Phi(\theta) = \frac{1}{2}[1 + \epsilon(i/\hbar)V(\theta)]\psi(\theta),$$

で与えられる。これを角運動量の固有状態で展開する、

$$\Phi(\theta) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} C_r e^{r\theta}, \quad (59)$$

このとき、展開係数は次の関係式を満たす。

$$T_m C_m - \sum_{r \neq 0} W_r C_{m+r} = W_0 C_m, \quad (60)$$

ここで、

$$T_m = \tan\left(\frac{\epsilon T}{2\hbar} - \frac{\hbar T}{4} m^2\right), \quad (61)$$

$$W_r = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{ir\theta} \tan(V(\theta)/2\hbar), \quad (62)$$

である。これは強結合モデルのシュレーディンガー方程式と同じ形である。ただし、ポテンシャルが不連続で発散をもち、ホッピングが長距離にわたるといった点など、異なる点も多い。逆に、一次元ランダム系と kicked rotor の局在の違いはここに起因すると見ることもできる。特に、量子波束の拡散を見たとき、long-range にわたる hopping がある故に、ランダム系では見られない古典対応の拡散領域が存在するといえる。

さらに、ポテンシャルを

$$V(\theta) = 2\hbar \tan^{-1}(k \cos \theta - E) \quad (63)$$

とおけば、最近接サイト間のホッピングのみを持つ強結合モデルになる。

$$C_{m+1} + C_{m-1} - \tan\left(\frac{\epsilon T}{2\hbar} - \frac{T}{4} m^2\right) C_m = \frac{2E}{k} C_m. \quad (64)$$

強結合モデルの対角項（オンサイトポテンシャル）に相当する部分 $V_m = \tan\left(\frac{\epsilon T}{2\hbar} - \frac{T}{4} m^2\right)$ の分布は近似的にローレンツ分布になるので、これをランダム系のロイドモデルとみなせば、その局在長を解析的に評価することもできる [57, 58]。

これをさらに象徴的に書けば、

$$C_{m+1} + C_{m-1} + V \tan(\pi\alpha m + \beta)C_m = EC_m, \quad (65)$$

となり、ハーパーモデルの \cos 関数を \tan 関数に置き換えたものになる。(これは、式 (57) において、 $p_\theta^2/2 \rightarrow \alpha p_\theta$ と線形振動子に置き換えたものに相当する [59, 32, 60]。) ハーパーモデルの場合と同様に、 α が有理数ならば、バンド構造を持ちブロッホ状態をとる。 α が Liouville 無理数の場合、準周期系となる。但し、ポテンシャルが有界ではなく発散することは、ハーパーモデルと大いに異なり、 α が Diophantine 無理数の場合、任意の $V > 0$ に対して、リャプノフ指数が正 ($\gamma > 0$) で固有関数は指数関数的に局在する。

E グリーン関数による局在・非局在の記述

ここでは、物理で局在・非局在の判別に頻繁に用いられるグリーン関数のスペクトル表現や物理量との関係を示す。

E.1 状態密度とリャプノフ指数

Green 関数の性質により局在・非局在状態の特性をみることができる [5]。

グリーン関数は H をエルミート演算子 (ハミルトニアン) として、 $(z - H)$ の全ての固有値が零でない場合、

$$G(z) = \frac{1}{z - H}, \quad (66)$$

であたえられる演算子である。 $H|m\rangle = E_m|m\rangle$ とし、 H の固有値を E_m 、固有状態を $|m\rangle$ とする。このとき、 r, r' はてきとうな位置座標として、次のグリーン関数は実軸 (エネルギー軸: $E = \text{Re}z$, $z = E \pm is$) 上以外では解析的である。

$$G(z; r, r') = \sum_m \frac{\langle r|m\rangle\langle m|r'\rangle}{z - E_m}, \quad (67)$$

$$= \sum_m \frac{\phi_m(r)\phi_m^*(r')}{z - E_m} \quad (68)$$

ここで、 $\phi_m(r) = \langle r|m\rangle$ である。また、次のように展開して表せる。

$$G(z; r, r') = z \sum_k \sum_m \phi_m(r)\phi_m^*(r') \left(\frac{E_m}{z}\right)^k. \quad (69)$$

以下では、 $z = E \pm is$ とし、 n, m を離散変数として、1次元離散系を考える。このとき、グリーン関数は次のように与えられる。

$$\begin{aligned} G^\pm(E) &= \lim_{s \rightarrow 0^+} \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{E - \epsilon_n \pm is} \\ &= PV \sum_n \frac{|n\rangle\langle n|}{E - \epsilon_n} \mp i\pi \sum_n \delta(E - \epsilon_n) |n\rangle\langle n|. \end{aligned} \quad (70)$$

従って、状態密度 (DOS) $N(E)$ や局所状態密度 (LDOS) $N_\ell(E)$ はグリーン関数の対角要素により次のように与えられる。

$$N(E) = \pm \frac{1}{\pi} \text{Im}[\text{Tr}G^\pm(E)], \quad (71)$$

$$N_\ell(E) = \pm \frac{1}{\pi} \text{Im}G^\pm(\ell, \ell, E), \quad (72)$$

ここで、 $G^\pm(\ell, \ell, E) = \langle \ell | G^\pm(E) | \ell \rangle$ は局所グリーン関数である。

これらの関係式より、 H が離散固有値を持つ場合、実軸上の H の固有値がグリーン関数 $G(z)$ の極に対応し、極の位数が固有値の縮退度に対応する。固有状態は指数関数的局在を示す。一方、連続スペクトルは、グリーン関数 $G(z)$ の特異性を示す実軸上の分岐線 (ブランチカット) として現れる。典型的な例が、 H が周期系で連続固有値を持つブロッホ状態のように空間的に減衰しない広がった状態の場合である。さらに、ランダム系においても、局在状態と関連した連続スペクトルが存在する可能性がある。

上記の中間的なものとして、 H が連続固有値を持ち実空間で減衰する (局在?) 状態が存在する場合は、グリーン関数 $\lim_{s \rightarrow 0^+} G(\ell, \ell : E \pm is)$ は実軸上では存在しない。具体的なイメージとしては、 $n \rightarrow \infty$ で空間的に decay して、 $N \rightarrow \infty$ (N は格子数) において、 $\{\phi_n(r)\}$ が零であるにもかかわらず規格化不可能 (連続スペクトルをもつ) なべき的減衰の場合である。この場合、実軸 (エネルギー軸) 自体が状態密度関数 $N(E)$ の自然境界となる可能性がある。(固有関数や波動関数の自然境界とは異なることに注意。) グリーン関数のブランチカットもしくは自然境界の位置が連続スペクトルの位置を与え、グリーン関数の不連続性 (特異性) は、状態密度 $N(E)$ を与えるとわかる。状態密度は絶対連続スペクトルが存在しないと一般には特異的になるため、より素直な (well-defined な、安定な) 積分状態密度 $I(E) = \int_{-\infty}^E N(E') dE'$ を用いてスペクトル密度 (関数) の性質を調べることも多い。

以上はハミルトニアン H で与えられる体系を、有限系 ($N < \infty$) とすれば、ランダム系か、準周期系か周期系かに関係なく成立する。決定的に違いが表れるのは無限系 ($N \rightarrow \infty$) に移行した時である。ここで注意が要る。エネルギーを $E \rightarrow E \pm is$ として、 $s \rightarrow 0$ の極限を先に取りるかシステムサイズ無限大の極限 $N \rightarrow \infty$ を先行するかにより結果は異なる。明らかに、 $\lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{s \rightarrow 0} \text{Im}G^\pm(E \pm is)$ ではシステムの状態密度 $N(E)$ に質的違いは現れない。しかし、逆に $\lim_{s \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Im}G^\pm(E \pm is)$ とすれば質的違いが表れて、ランダム系なら特異的な点スペクトルとなり、周期系なら絶対連続スペクトルとなる。一般に、エネルギー表示のグリーン関数 $G(E)$ を複素変数の空間へ定義域を広げることでシステムの本質を探り出せるということである。

有限系 N からの熱力学極限 $N \rightarrow \infty$ を用いて、単位サイト当たりの状態密度 $\rho(E)$ を明示すれば、

$$\rho(E) = \mp \frac{1}{\pi} \lim_{s \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \text{Tr} \text{Im}G(E \pm is) \quad (73)$$

$$= \mp \frac{1}{\pi} \lim_{s \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{\ell}^N \text{Im}G(\ell, \ell, E \pm is) \quad (74)$$

ということになる。このようにポテンシャル列 V_n の特徴が固有値分布やスペクトルにどのように反映されるのかの特徴づけにおいても、最低でも複素空間を利用せざる負えないわけである²³。また、局所グリーン関数 $G(0, 0, E)$ の期待値 $E[\dots]$ と単位サイト当たりの状態密度 $\rho(E)$ やリャプノフ指数 $\gamma(E)$ との関係は、

$$\mathbf{E}[G(0, 0, E)] = \int^E \frac{dk(E')}{E' - E} = \int^E \frac{\rho(E')dE'}{E' - E}, \quad (75)$$

$$\gamma(E) = \int^E \ln |E' - E| dk(E') = \int^E \ln |E' - E| \rho(E') dE', \quad (76)$$

と与えられる。後者の式は Thouless 公式という。

この論文で使ったような、物理的に取り扱い易い、半無限系の 1 次元強結合モデルを考える。

$$Eu(n) = u(n+1) + u(n-1) + V(n)u(n), \quad n = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (77)$$

において、 $R_n \equiv u(n+1)/u(n)$ と定義すれば、

$$R_n = V_n - E - \frac{1}{R_{n-1}}, \quad (78)$$

となる。ここで、次の量 (複素リャプノフ指数) を定義する。

$$\Omega(E) \equiv \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \log R_n \right] = \langle \log R_n \rangle, \quad (79)$$

この量が well-defined とすれば、これの実部と虚部が、リャプノフ指数 $\gamma(E)$ と積算状態密度 $I(E)$ に対応する。

$$\gamma(E) = \text{Re} \Omega(E), \quad I(E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \Omega(E), \quad (80)$$

ここで、虚数部分は、対数関数の中の R_n が負になる回数 (波動関数の節の数) をカウントしていることになる。1 次元ランダム系では $N \rightarrow \infty$ という熱力学的極限で、ポテンシャルのランダムネス W が任意の大きさならば、 $\gamma(E) > 0$ となり、指数関数的に局在する。

注意: グリーン関数 $G(n, m, z)$ の特解を用いた表示 $G(n, m, z)$ もしばしばスペクトル理論で用いられる。 $u_{\pm}(n)$ は両無限ヤコビ行列 $J_{(-\infty)}^{(\infty)}$ の $n \rightarrow \pm\infty$ で $\ell^2(Z)$ に属する独立な特解 (減衰解、増大解) とする。実質的には、 $n \rightarrow \pm\infty$ で各々が指数関数的減衰する解を意味する。このとき、グリーン関数の特解による表示 $G(n, m, z)$ は、 $n \leq m$ として、

$$G(n, m, z) = \langle n | (z - H)^{-1} | m \rangle \quad (81)$$

$$= \frac{u_+(m)u_-(n)}{u_+(1)u_-(0) - u_-(1)u_+(0)}, \quad (82)$$

²³ エネルギーレベル統計なども、これらの傾向を定性的にとらえようとする指標のひとつとみなせる。

で与えられる。上記の第二式の分母は Wronskian である。次に、 $n \rightarrow \pm\infty$ で指数関数的に減衰する解を $n = 0$ で結び付ける。このとき、 $n = 0$ での局所グリーン関数 $G(0, 0, z)$ に関し、つぎの関係式が成立する。

$$G(0, 0, z) = -\frac{1}{m_+^0(z) + m_-^0(z) + z - V(0)}. \quad (83)$$

ここで、ワイル関数に相当する $m_{\pm}^0(z)$ (m -function) は、

$$m_-^0(z) = -\frac{u_-(-1)}{u_-(0)}, m_+^0(z) = \frac{u_+(+1)}{u_+(0)} \quad (84)$$

と、作用素の特解でつくられる。これは、差分型のリッカチ方程式の解であり、Herglotz 関数になっている。(Herglotz 関数とは C_+ を C_+ に写す正則関数でその虚部が非負のもをいう。) また、系の平行移動に関する対称性から $n = 0$ で言えることは一般の n でも成立する。そのときは、

$$m_-(z, n) = -\frac{u_-(n-1)}{u_-(n)}, m_+(z, n) = \frac{u_+(n+1)}{u_+(n)} \quad (85)$$

を m -function として用いる。すなわち、グリーン関数の対角要素 $G(n, n, z)$ の z に関する解析性は、 $m_+(z, n) + m_-(z, n) + z - V(n)$ の解析性と関連することがわかる。絶対連続スペクトルの場合 m -function は、

$$m_{\pm}(E) = \int^E \frac{\rho(x)dx}{x - E} \quad (86)$$

と状態密度を用いて表せ、グリーン関数の対角要素に対応する。

F 小谷理論と局在・非局在問題

この付録では、「絶対連続スペクトルの不在」と「自然境界」に関する数学的理論を理解するためのキーワード「小谷理論の非決定性」、「右極限」、「無反射性」に関して、離散系の表示を用いて、著者らの理解の及ぶ範囲内で説明する。ポテンシャル $V(n)$ がランダムな場合に、固有関数の指数関数的局在を示すためだけなら、伝達行列に関する Furstenberg の定理や Oseledec-Ruelle の定理を用いるのみで十分であろうが、「強い局在」、「弱い局在」のためのポテンシャルに対するギリギリの必要条件を探ろうという場合には、このような考えが有効になると思う。詳細な数学的表現に関しては、既に挙げた文献のほかに、[39, 40, 41] も参照するとよい。また日本語の解説 [22] もある。

F.1 数学的記述

一次元の離散系のランダムシュレーディンガー作用素、

$$Hu(n) = u(n+1) + u(n-1) + V(n)u(n), \quad (87)$$

に関する局在理論をまとめておく。 $u(n) \in \ell^2(Z)$ とする。連続系も離散系と同じ取り扱いで示さる。この作用素のスペクトルの特異性と局在化の程度は対応している。 $V(n, \omega) = f(T^n(\omega))$ であたえられるポテンシャルである。 T は確率 P のもとで、エルゴード的な保測変換である。すなわち、 $V(n, T^m\omega) = V(n+m, \omega)$ ($n, m \in Z$) で、独立同分布で有界な密度 $P(x)$ をもち、 $\int_R \log(1+|V|)P(V)dV < +\infty$ (可積分性をもつ) とする。確率過程の言葉で表現すれば、エルゴード的で二次のモーメントが有限な定常過程 $V(n)$ が存在するということに対応する。このとき、

R 上の殆ど全ての点で、ランダムシュレーディンガー作用素は、 $\gamma(E) > 0$ (リャプノフ指数が正値をもつ) が言える。すなわち、 $\Sigma_{a.c.} = \phi$ (絶対連続スペクトルは存在しない) となる。

「エルゴード性」からコロモゴロフの 0-1 法則が使え、「 R 上の殆ど全ての点」での成立することがいえる。ここでの可積分性は「有界性」といったほうがいい。

小谷理論では、 $V(n)$ が定常過程として独立性やマルコフ性などよよりはるかに弱い条件として、「非決定論的である」ならば、上記の結論が成立する。

この条件は「絶対連続スペクトル不在 (弱い意味の局在) と自然境界の存在」を結びつける重要な条件である。

小谷の非決定性: $V(n)$ の過去 ($n \in Z_-$) と未来 ($n \in Z_+$) が確率測度 P に関して異なる情報をもつということである。

右極限と無反射性: スペクトル理論において、「右極限」(Right limits) という概念は、片側無限のヤコビ行列 $J^{(\infty)} = \{b_n, a_n\}_{n=0}^{\infty}$ からひとつの両側無限のヤコビ行列 $J_{(-\infty)}^{(\infty)} = \{b_n^{(\infty)}, a_n^{(\infty)}\}_{n=-\infty}^{\infty}$ を構成するために Last-Simon(1996) により導入された。ある $n_k \rightarrow \infty$ と全ての m に対して、

$$b_m^{(\infty)} = \lim_{k \rightarrow \infty} b_{m+n_k}, a_m^{(\infty)} = \lim_{k \rightarrow \infty} a_{m+n_k}, \quad (88)$$

ならば、 $J_{(-\infty)}^{(\infty)}$ は $J_{(-\infty)}$ の右極限という。 $(b_m^{(\infty)})$ や $(a_m^{(\infty)})$ は一意ではない。) つまりこのように作成された右極限は、半無限列から構成されたという点で、明らかに「小谷の非決定性」を満たさない。また、ベキ級数の係数列として $b_m^{(\infty)}$ (または、 $a_m^{(\infty)}$) を用いて関数の右極限 (と左極限)

$$f_-(z) = \sum_{n=-\infty}^0 b_n z^n, f_+(z) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n z^n, \quad (89)$$

を構成する。 $f_+(z)$ は $|z| < 1$ で解析的で、 $f_-(z)$ は $|z| > 1$ で解析的である。 $f_+(z)$ と $f_-(z)$ が領域 $|z| = 1$ を超えて解析接続可能ならばその領域で、関数 $f(z) = f_-(z) + f_+(z)$ は無反射であるという。

無反射性と無反射両無限ヤコビ行列: 一般の両無限ヤコビ行列 $J_{(-\infty)}^{(\infty)}$ の場合を考える。このとき、 $n = 0$ で非対角要素を $a_0 = 0$ とおくことにより二つの半無限ヤコビ行列 J^+ と

J^- に分離できる。其々に対し、 $C_+ = \{z : \text{Im}z > 0\}$ で定義した離散系の Weyl 関数を、

$$m_+(z, J^+) = \langle 1 | (z - J^-)^{-1} | 1 \rangle, m_-(z, J^-) = \langle 0 | (z - J^-)^{-1} | 0 \rangle, \quad (90)$$

とする。すなわち、 $m_+(z, J^+) m_-(z, J^-)$ は、 J^+ と J^- に関する $n = 1, 0$ での局所グリーン関数である。このとき、

$$m_+(E + i0, J^+) = -a_0^2 \overline{m_-(E + i0, J^-)^{-1}}, \quad (91)$$

が全ての E 上で成立するならば $J_{(-\infty)}^{(\infty)}$ を無反射両無限ヤコビ行列という。また、これが成立すれば、系の平行移動に関する対称性から、上記のことは一般の n でも成立するため、 $n = 0$ の位置を移動させて順次対角成分 $b_n (n \leq 0)$ を決定することができる。すなわち、 $J_{(-\infty)}^{(\infty)}$ の右半分 J^+ を使い左半分 J^- を決めることができるので、小谷の意味での**決定論的**となる。これは、対応する $V(n)$ はスペクトル $\sigma(H)$ 内の開区間 I 上で無反射ポテンシャルであることと同値である。

散乱理論において、一般にポテンシャルを $V(n)$ として左反射係数が $[0, \infty)$ で消えるとき、 $V(n)$ は $[0, \infty)$ 上で無反射であるという。物理的には、 $n = -\infty$ で発生した波がポテンシャル $\{V(n)\}$ に散乱されずに $n = \infty$ に到達することに対応する。例えば、周期ポテンシャルは演算子 H のスペクトル $\sigma(H)$ の内点で無反射スペクトルである。ランダムポテンシャルは $\{E \in R | \gamma(E) = 0\}$ を満たす領域上でのみ無反射である。

F.2 杜撰な物理的表現

小谷理論で、確率的ポテンシャル列に課される「強局在」のためのひとつの条件として「定常性」があげられる。半無限系 ($n \geq 0$) として、数値計算が容易な物理的表現で考える。このとき、ポテンシャル列 $V(n)$ の相関関数 $C(n)$ とパワースペクトル $S(f)$ を次式で定義する²⁴。

$$C(n) = \langle V(n_0)V(n_0 + n) \rangle, S(f) = \frac{1}{N} \sum_n^N C(n) \exp(-ifn), \quad (92)$$

ここで、 $f = 2\pi \frac{n}{N}$ である。直接、ポテンシャル列 $V(n)$ とパワースペクトルとの関係は、

$$S(f) = \frac{1}{N} \left\langle \left| \sum_{n=0}^{N-1} V(n) e^{-2\pi i \frac{fn}{N}} \right|^2 \right\rangle, \quad (93)$$

となる。杜撰な物理的表現をすれば、定常性とは $n \in R$ ならばどこでも平均や分散などの統計的量が変動しないことである。パワースペクトルが

$$\int_{f^*}^{\infty} |S(f)| df < \infty, \quad (94)$$

²⁴注意：このときのパワースペクトルと自己共役作用素の固有値問題でのスペクトル（いわゆるスペクトル理論）は異なる意味である。ちなみに、 $V(n)$ が Thue-Morse 列の場合はパワースペクトルとハミルトニアン演算子のどちらのスペクトルも特異連続になることが知られている。

を満たせば、定常性は保証される。ここで、 $f^*(> 0)$ は適当な数、つまり、原点近傍の特異性からくる発散が抑えられている。定常領域では、ウイナー・ヒンチンの定理より、パワースペクトルは確率変動の自己相関関数 $C(x) = \langle q(x)q(0) \rangle$ のフーリエ変換である。

$$S(f) = \int_{-\infty}^{\infty} C(x)e^{-ifx} dx. \quad (95)$$

いわゆる $1/f$ 型ノイズは、

$$S(f) \sim \frac{1}{f^\alpha}, \quad (96)$$

で $\alpha \geq 1$ であり非定常ノイズともいわれる。 $\alpha < 1$ が「定常」に対応する。

物理的に杜撰に解釈すれば、短距離相関の場合のみならず、べき関数的に相関が減衰する長距離相関のある場合ですら、次のようにべき減衰がそれより速く減衰すれば、定常性は成立する。

$$C(n) = \langle V(n_0)V(n_0 + n) \rangle \sim \frac{1}{n^k}, k > 0, \quad (97)$$

すなわち、小谷理論は一次元ランダム系に対しては強力に局在を示す定理である。

パワースペクトルが $\alpha > 1$ のべき指数で減衰する場合に、移動度端が存在するという数値計算の結果もある。これは、上記の意味でポテンシャル列の定常性を破っているので、小谷理論に矛盾するわけではない。本文でも一部言及したように、物理では高次の相関が効く場合や相関が減衰しない非定常列を用いた非局在化（局在・非局在転移）の研究が進められている。Garcia らは、Weierstrass 関数を用いてフラクタル次元 $D > 3/2$ で局在から非局状態への在転移が生じると報告している。そのときのポテンシャル列は、Weierstrass 関数を modified した、次のものである。

$$V(n) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sin(a^k n/N + \phi_k)}{a^{(2-D)k}} \quad (\text{Weierstrass potential}), \quad (98)$$

$a > 1$, フラクタル次元 $1 < D < 2$ で、 ϕ_k は $[0, 2\pi]$ の一様分布である。各サイトで独立ではなく、位相の形でランダムネスが入り、システム全体で強い高次の相関を持っている。 $n/N = x$, $\phi_k = 0$ とすれば、「いたるところ微分不可能な連続関数として有名な Weierstrass 関数」となる。

Weierstrass 関数は、そのフラクタル次元 D とパワースペクトル $S(f)$ の間に次の経験則がある。

$$S(f) \sim \frac{1}{f^{5-2D} \log a} \quad (99)$$

すなわち、上記の $S(f) \sim 1/f^\alpha$ の関係から

$$D = 1 + \frac{3 - \alpha}{2}, \quad (100)$$

となる。これによれば、非定常性 $\alpha \geq 2$ は $D \geq 3/2$ に対応する。実際、 $D = 3/2$ のフラクタル関数をポテンシャル列の生成関数として用い局在・非局在の転移を観測できる可能性が数値計算で示されている [61, 62]。図 15 にフラクタル次元 D に対する Lyapunov 指数の変化を示している。 $D \sim 3/2$ で非局在を示す $\gamma \sim 0$ から指数関数的局在を示す $\gamma > 0$ へと転移していく様子がわかる。

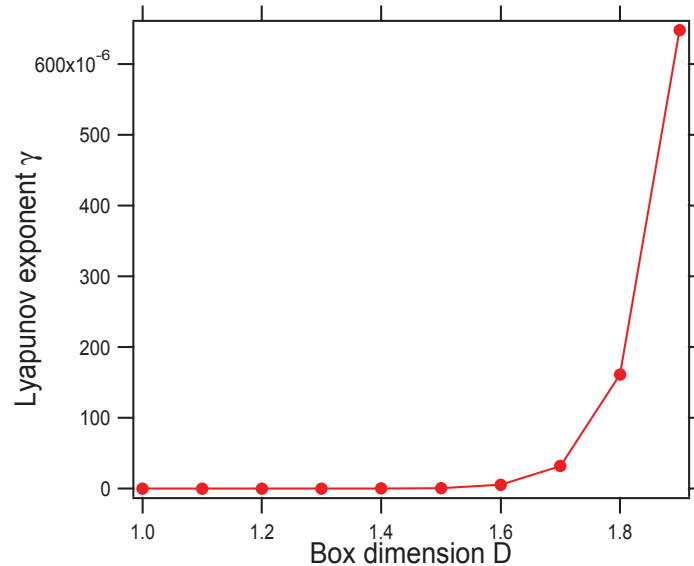


図 15: (Color online) Weierstrass potential のフラクタル次元 D に対するリャプノフ指数の変化。 $a = 2, N = 10^5, E = 0$, 2^{10} 個のサンプル平均。

また、パワースペクトル $S(f) \sim f^{-\alpha}$ を持つポテンシャル列は、フーリエ変換 (Fourier filtering method :FFM) を利用して、次のように作成することもできる。

$$V(n) = \sum_{k=1}^{N/2} \left[k^{-\alpha} \left| \frac{2\pi}{N} \right|^{(1-\alpha)} \right]^{-1/2} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k\right) \quad (\text{FFM potential}). \quad (101)$$

実際に使うときには、 $[-V, V]$ に入るように規格化をする。これは、一次元系の移動度端の存在に関する研究に使われている [63, 64]。

謝辞

本稿は、思いがけず早逝された田崎氏への追悼論文として物性研究「非平衡統計物理学の展望-田崎秀一さんを偲んで-」 [66] に掲載していただく事を志して起稿されたものであるが残念ながら時間的に間に合わなかった。改めて本稿を田崎氏の霊前にささげたい。

この原稿の一部は、2005年に立命館大学で開かれた国際会議“International Symposium of Complexified Dynamics, Tunnelling and Chaos”の際に準備したものである。

この研究には、部分的に日本の税金が使われています。納税者である日本国民に感謝します。また、この研究の一部は、河原屋辻亭と、越後小池記念館を利用し遂行されました。関係者に深謝します。

参考文献

- [1] 山田弘明, 池田研介, 「パデ解析による波動関数の特異性診断-その壱-」、物性研究。(本稿で [1] として引用している。)
- [2] G. A. Baker Jr, *Essentials of Padé Approximants* (Academic Press, 1975).
- [3] George G.A. Baker and P. Graves-Morris, *Padé Approximants 2nd Edition*, (Cambridge University Press, 1996).
- [4] J. L. Gammel and J. Nuttall, *J. Math. Anal. Appl.* **43**, 694-696 (1973).
- [5] E. N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, (Spring-Verlag, Berlin, 1983).
- [6] See, for example, L.M. Lifshiz, S.A. Gredeskul and L.A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems*, (Wiley, New York, 1988).
- [7] K. Ishii, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53**, 77(1973).
- [8] P.G.Harper, *Proc. Phys. Soc. London, Sect. A* **68**, 874(1955).
- [9] Y.Last, Almost everything about the almost Mathieu operator I, pp366-372, in *XIth International Congress of Mathematical Physics*, Ed. by D.Iagolnitzer, (International Press Inc. 1995).
- [10] S.Y.Jitomirskaya, Almost everything about the almost Mathieu operator II, pp373-382, in *XIth International Congress of Mathematical Physics*, Ed. by D.Iagolnitzer, (International Press Inc. 1995).
- [11] S. Aubry and G. Andre, *Ann. Isr. Phys. Soc.* **3**, 133(1980).
- [12] S. Ostlund and R. Pandit, *Phys. Rev. B* **29**, 1394(1984),
- [13] M. V. Berry, *J. Phys. A: Math. Gen.* **29**, 6617(1996).
- [14] D. Wojcik, I. Bialynicki-Birula, K. Zyczkowski, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5022 (2000).
- [15] B. Simon, *Szego's Theorem and Its Descendants*, (Princeton University Press, Princeton and Oxford, 2011).

- [16] H. Aoki, J. Phys. C **16** L205(1983).
- [17] C. M. Soukoulis and E. N. Economou, Phys. Rev. Lett. **52**, 565-568 (1984).
- [18] L. Pietronero and A. P. Siebesma, E. Tosatti, M. Zannetti, Phys. Rev. B **36**, 5635-5638 (1987).
- [19] A. P. Siebesma and L. Pietronero, Europhys. Lett. **4** 597(1987).
- [20] M. Schreiber, Physica A **167**, 188-198(1990).
- [21] J. Breuer and B. Simon, Advances in Mathematics **226**, 4902-4920(2011). arXiv:1002.0823v2 [math.CV].
- [22] 小谷真一、「ランダム・ポテンシャルの問題」, 数学 **38**, 53(1986); 「ランダム・ポテンシャルの問題II」, 数学 **38**, 193(1986); 福島正俊、「ランダム Schrodinger 作用素に関する小谷理論」 数学 **38**, 74(1986).
- [23] A. Berretti and L. Chierchia, Nonlinearity **3**, 39(1990).
- [24] C. Falcolini and R. Llave, J. Stat. Phys. **67**, 645(1992).
- [25] R. Llave and S. Tompaidis, Physica D **71**, 55(1994).
- [26] A. Berretti and S. Marmi, Chaos, Solitons and Fractals, **5**, 257(1995).
- [27] A. Berretti and C. Falcolini, and G. Gentile, Phs. Rev. E **64**, 015202-1(2001).
- [28] J.M. Greene and I.C. Percival, Physica D **3**, 530(1981); I.C. Percival, Physica D **6**, 67(1982).
- [29] S. Aubry, Physica D **7**, 240(1983).
- [30] Oleg M. Braun and Yuri S. Kivshar, *The Frenkel-Kontorova Model: Concepts, Methods, and Applications*, (Springer,2004).
- [31] J.A.Ketoja and I.I.Satija, Phys. Rev. Lett. **75**, 2762(1995).
- [32] I.I.Satija, B.Sundaram, J.A.Ketoja, Phys. Rev. E **60**, 453(1999).
- [33] A. Jazaeri and I.I. Satija, Phys. Rev. E **63**, 036222(2001).
- [34] G.B. Arfken, Hans J. Weber, Frank E. Harris, *Mathematical Methods for Physicists*, 7th Edition, (Academic Press 2012).
- [35] K.Sakurada, M.Goda, H.Yamada, Phys. Lett. A, **280**, 361-364(2001).
- [36] H.S. Yamada and K.S. Ikeda, in preparation.

- [37] H.S. Yamada and K.S. Ikeda, "Analyticity of Quantum States in One-Dimensional Tight-Binding Model", preprint.
- [38] H.S. Yamada and K.S. Ikeda, "A Numerical Test of Pade Approximation for Some Functions with singularity", preprint.
- [39] 小谷眞一, 俣野博 「微分方程式と固有関数展開」 岩波講座現代数学の基礎 1998.
- [40] 南 就将, "ランダム・シュレーディンガー作用素の基礎", 講義ノート (2010).
- [41] P.Stollmann, *Caught by Disorder: Bound States in Random Media*, (Birkhauser, 2001).
- [42] P. Bougerol and J. Lacroix, *Products of Random Matrices with Applications to Schrodinger Operators*, (Birkhauser, 1985).
- [43] Ya. Goldsheid, S. Molchanov, and L. Pastur, *Funct. Anal. Appl.* **11**, 1-10 (1977).
- [44] S. Kotani, "Lyaponov indices determine absolutely continuous spectra of stationary random onedimensional Schrodinger operators", *Proc. Kyoto Stoch. Conf.*, 1982.
- [45] B. Simon, *Commun. Math. Phys.* **89**, 227-234(1983).
- [46] S. Kotani, *Rev. Math.Phys.* **1**, 129-133(1989).
- [47] Y. Last and B. Simon, *Invent. Math.* **135**, 329-367(1999).
- [48] D. Damanik and R. Killip, *Math. Res. Lett.* **12**, 187-192(2005).
- [49] C. Remling, *Ann. Math.* **174**, 125-171(2011).
- [50] T.W. Korner, *Fourier analysis*, (Cambridge University Press 1988); *Exercises for Fourier Analysis*, (Cambridge University Press 1993).
- [51] R. Remmert, *Classical Topics in Complex Function Theory*, (Springer New York; 1st Edition 2010).
- [52] D. R. Hofstadter, *Phys. Rev. B* **14**, 2239-2249(1976).
- [53] M.Ya. Azbel, *JETP* **19**, 634(1964).
- [54] M. Wilkinson, *Proc. Roy. Soc. London, A* **403**, 153 (1984).
- [55] J.B. Sokoloff, *Phys. Rep.* **126**, 189(1985).
- [56] S. Fishman, D.R. Grempel and R.E. Prange, *Phys. Rev. Lett.* , **49**, 509 (1982).
- [57] P.Lloyd, *J. Phys. C* **2**, 1717(1969).

- [58] T. Hirota and K. Ishii, Prog. Theor. Phys. **45**, 1713-1715(1971).
- [59] M.V. Berry, Physica D **10**, 369-378(1984).
- [60] I. Dana and D.L. Dorofeev, Phys. Rev. E **73**, 026206(2006).
- [61] A. M. Garcia-Garcia, E. Cuevas, Phys. Rev. B **79**, 073104 (2009).
- [62] A. M. Garcia-Garcia, E. Cuevas, Phys. Rev. B **82**, 033412 (2010).
- [63] F.A.B.F. Moura and M.L.Lyra, Phys.Rev.Lett. **81**, 3735(1998).
- [64] F.M.Izrailev and A.A.Krokhim, Phys.Rev.Lett. **82**, 4062(1999).
- [65] E. ハーバート ノーマン, 「忘れられた思想家—安藤昌益のこと 〈上巻〉〈下巻〉」 (岩波新書 1950).
- [66] 物性研究 **97**, no.3, 2011/12 特集「非平衡統計物理学の展望—田崎秀一さんを偲んで—」 Perspectives of Nonequilibrium Statistical Physics –The Memory of Professor Shuichi Tasaki–.