解　　説

「テクニカルタームの解説」

本号より新企画として，テクニカルタームの簡単な解説を載せることになった。テクニカルタームと云うと一寸高尚に聞えるが，中にはやたらと新語を作って，カッコよがる（？）向もあるようで，物理学界の中に或種の language barrier が築かれている面もなきにしもあらずである。けれどもこの種の流行語・新造語をも含めて，テクニカルタームは大なり小なりそれが必要と考えられ便利と思われるだけの研究情勢，研究内容と云う背景があると考えたい。「物理学会誌」に「物理学メモ」と云う欄が連載されたが，これはいわばかなり確立したテクニカルタムに対する岩波理化学辞典増補版のようなものであった。「物性研究」は，establish されていない内容，orthodox でない接近法を含むことを特徴とし流動的な研究意見，情報の交換の場である。本誌のテクニカルタームの解説もこのようなスタイルでありたいと思う。この企画が多少なりとも異る研究分野間の barrier の除去と異るグループ間の活発な批判，意見の交換のよすがともなれば幸である。

（松田）

"Degree of Localization"

不規則鎖の電子状態，振動状態の研究で用いられるこの言葉は，まだ確立した適当な定義があって一般に受入れられる段階になっていない。

事の起りは，一次元不規則ポテンシャルの存在下での一電子 Schrödinger 方程式の固有関数はすべて空間的に局在していると云う Mott－Twose の御託宣[1)2)]に始まる。局在するとはその固有関数に特有な空間の一点から関数の絶対値の上限は指数関数的に距離と共に減少すると云うのである。もしそうなら，このときの damping constant を degree of localization と呼んでよさそうだが，そう定義した論文はないようである。一次元不規則系で局在すると考える Mott らの根拠は次のようなものである。（i）系の左端

で境界条件を与えられた或エネルギーの波動関数は右に進むに従って不規則ポテンシャルのために大抵指数関数的に増加すると考えてよい。右端から左端へ進むときも同様である。(ii) 固有関数は同じエネルギーに属する上記二つの波動関数の対数導関数が中間の一点で一致する(phase-matching)ようなエネルギー(固有値)に対応するものである。対数導関数の値はエネルギーの関数として大体のエネルギー領域で一定であるが，特定の狭いエネルギー領域で $-\infty$ から $+\infty$ まで急激に値を変え，ここで phase-matching が起る。(iii) 従って左から右へ進ませた波に対してエネルギーがこの領域に入って matching が起っても右から左へ進ませた波は特定のエネルギーに対応する特別なものとは考えられないから，やはり大抵指数関数的に増加しており，同じことが左右を入れかえても云えるだろう。このことは exponential localization を意味する。

Borland[3)] は，これらの予想の中 (i) を高エネルギーの極限で証明定量化することに成功した。彼は

$$- d^2\psi/dx^2 + V(x)\psi = k^2\psi \tag{1}$$

$$V(x) = -\mu\sum_i \delta(x-x_i), \quad (x_i < x_{i+1}) \tag{2}$$

なる系で間隔 $x_{i+1}-x_i$ が異なる i 同志に相関なく分布する場合を考え

$$\psi(x) = A_i \cos[k(x-x_i) + \varepsilon_i] \tag{3}$$

$$= \pm A_i \cos[k(x-x_{i-1}) + \varepsilon_i'] \quad (x_{i-1} < x < x_i)$$

とおいて

$$\ell n(A_{i+N}^2/A_i^2) = \sum_{j=0}^{N-1} \ell n\, f(\varepsilon_{i+j}) \tag{4}$$

$$f(\varepsilon_i) \equiv A_{i+1}^2/A_i^2 = d\varepsilon_i/d\varepsilon_i' \tag{5}$$

を導き，$k\to\infty$ の極限で左端で境界条件を与えた波について

$$< \ell n\,|f(\varepsilon)| > \quad > 0 \tag{6}$$

なることを示した。ただし<…>は集団平均を示す。集団平均が大多数の sample についての値と一致するとすると (6) は (i) を支持することになり，(ii) 以下の考えが正しければ $<\ell nf>$ は localization の degree を与えると云ってよい。

Hori-Minami[4] はこの $<\ell nf>$ を次のように一般化した。

電子の場合も，nearest neighbor harmonic interaction をなす振動子系も，或 site i の状態は2次元 vector $\begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix}$ で表わされ，それらは

$$\begin{pmatrix} x_{i+1} \\ y_{i+1} \end{pmatrix} = Q_i \begin{pmatrix} x_i \\ y_i \end{pmatrix} \tag{7}$$

$$Q_i = \begin{bmatrix} A_i & B_i \\ B_i^* & A_i^* \end{bmatrix} \tag{8}$$

の形で結ばれる。

$$Z_j = x_j / y_j = e^{i\delta_j} \tag{9}$$

とおくと

$$\frac{d\delta_j}{d\delta_{j+1}} = \frac{|x_{i+1}|^2 + |y_{i+1}|^2}{|x_i|^2 + |y_i|^2} \tag{10}$$

なる関係が導かれる。電子の場合は x_i, y_i は $\psi(x_i)$, $\psi'(x_i)$ と取ることが出来，振動の場合は変位に比例して取ることが出来るので，$<L> \equiv <\ell n(d\delta_j / d\delta_{j+1})>$ は Borland の $<\ell n|f(\epsilon)|>$ に対応する量である。Hori らは $<L>$ を "ensemble degree of localization" と呼び，一つの sample chain で j について平均して定義された L を "sample degree of localization" $\bar{L}$ と呼んで区別した。$<L>$ と $\bar{L}$ の一致は，phase $\{\delta_j\}$ を確率過程と見たときのエルゴード性に関連している。

我々が物理学的に知りたいのは，始めに述べたような指数関数の damping constant で，これと L とのつながりは conjecture (ii), (iii) の正当性

を条件としている。計算機実験とそれの解析の結果は上のつながりを支持しているようだが[5] 一般的な理論的基礎はまだ出来上っていない。

degree of localization は，かなり，アカデミックな興味の所産のようでもあり，それに寄せられる一般研究者の関心の degree of localization も相当高いようである。（ここで固有関数は規格化されているとする）

しかし長鎖状分子のように本質的に一次元的な物質の伝導現象を理解する上に，固有関数の特質を完全に理解することは重要である。固有関数は physical observable でないから重要でないとの考えに対しては Bloch 関数の果した役割とか液体 He の固有関数に対する Feynman の考察[6]を例に引きたい。とまれ degree of localization にまつわる不明快さを早く一次元から除いて，確実な基礎の上に更に現実的な問題に立向いたいものである。（基研，　松田博嗣）

1) N.F.Mott and W.D.Twose, Adv. Phys. 10 (1961), 107.

2) N.F.Mott, Adv. Phys. 16 (1967), 50.

3) R.E.Boreand, Proc. Roy. Soc. A. 274 (1963), 529.

4) J.Hori and S.Minami, 物研 8 (1967), F67.

5) H.Matsuda, 物研 10 (1968) No.5 非周期系の基礎物性研究会報告

6) R.P.Feynman, Progress in Low Temperature Physics Vol.1. (North-Holland Pub. Co., 1955), p.17.