State ratio, Thouless の exponential decay factor と degree of localization の関連について

北大理　　藤 田 武 彦

（ 12月 1日受理 ）

Thouless[1)]は最近 Herbert & Jones[2)] の得た結果に基づき一次元Anderson modelに対して eigenstate の localization distanceと固有値の分布の間の関係を議論した。結果として両端の解の幾何平均の対数で定義されるexponential decay factor は片側で境界条件をみたす解に対する表現と一致することが示された。これはBorland[3)] の直観的予想と符合する。Thouless の exponential decay factor の定義は高次元系に拡張することが可能である。一方我々は Green関数の非対角要素の ratio の対数平均によって degree of localization を定義した。[4)] 全系の固有エネルギーに対してはこの量は対応する site の state ratioに一致することが示される。任意のエネルギーに対する同様の表現を高次元系に対して求めることは一次元系の場合の Herzenberg & Modinos[5)] の Green関数にあたる表現を高次元系に対して求める問題と等価である。こゝでは Green関数の ratio が固有エネルギーに対しては任意次元系に対してstate ratioに一致すること及び高次元系の中の一次元方向に着目することによって Thouless の exponential decay factor を高次元系に拡張し ensemble averageを考えて degree of localization が導出されることを示す。

§ 1.　State ratioと Green関数の ratio

一次元系では Green関数の行列要素の ratio $G_{ij}/G_{i+1\,j}$ は任意のエネルギー Eに対して片側で境界条件を満している解の ratio u_i/u_{i+1}によって表わすことができる。これは一次元系，最近接相互作用の場合相互作用の 1 つを取り除くと系は 2つに分離し従って Green関数は片側で境界条件をみたす 2つの解

の積で表現できることに起因する。高次元系ではこの様なGreen関数をつくることは困難である。しかしながら固有状態の ratio として state ratio を定義するとそれはやはりGreen関数の行列要素の ratio で表現されることが示される。

Feenberg[6]は相互作用 potential の同じ行列要素が繰り返し表われない様な方法で固有値方程式を解くことにより state ratio の一つの表現を与えた。ここでは固有行列式の主小行列式展開[4]と固有値方程式を比較することによってこの結果を簡単に求め任意の site の state ratio に一般化できることを示す。

Anderson model を考え次の固有値方程式に着目する。

$$\sum_{\ell} \{(E-\varepsilon_{\ell})\delta_{\ell m} - V_{\ell m}\} u_{\ell} = 0 \tag{1}$$

こゝで ε_{ℓ} は ℓ番目の site の site energy, $V_{\ell m}$ は site pair (ℓ, m)の間の相互作用 potential, u_{ℓ} は ℓ番目の site に局在した状態 $|\ell>$ の確率振幅，Eは着目するエネルギーを表わす。i_f 番目の方程式に対して

$$(E-\varepsilon_{i_f})u_{i_f} = \sum_{\substack{i_1 \\ (\neq i_f)}}{}' V_{i_f i_1} u_{i_1} \tag{2}$$

こゝで $E-\varepsilon_{i_f}$ を α_{i_f} と定義すると

$$\alpha_{i_f} = \sum_{i_1}{}' V_{i_f i_1} (u_{i_1} / u_{i_f}) . \tag{3}$$

固有行列式をSとするとこれは $S=0$ を解くことと等価である。Sの主小行列式展開から

$$S = 0 = \alpha_{i_f} S^{i_f} - \sum_{m=1}^{N-1} \sum_{(i_1 i_2 \cdots i_m)}{}' V_{i_f i_1} V_{i_1 i_2} \cdots\cdots$$

$$\times V_{i_m i_f} S^{i_f i_1 \cdots\cdots i_m} \tag{4}$$

が得られる。但し, $S^{ij\cdots m}$ は $(i,i),(j,j),\cdots,(m,m)$要素に対する主小行列式を表わし和は $i_1 \neq i_f$, $i_2 \neq i_f, i_1, \cdots\cdots, i_m \neq i_f, i_1, \cdots\cdots i_{m-1}$ に関し

てとるものとする。このとき

$$\alpha_{i_f} = \sum_{m=1}^{N-1} \sum_{(i_1 i_2 \cdots i_m)}' V_{i_f i_1} V_{i_1 i_2} \cdots V_{i_m i_f} \cdot (S^{i_f i_1 \cdots i_m} / S^{i_f})$$

$$= \sum_{i_1}' V_{i_f i_1} \{ V_{i_1 i_f} (S^{i_f i_1} / S^{i_f}) +$$

$$\sum_{m=2}^{N-1} \sum_{(i_2 \cdots i_m)}' V_{i_1 i_2} \cdots V_{i_m i_f} \cdot (S^{i_f i_1 \cdots i_m} / S^{i_f}) \} \qquad (5)$$

i_f, i_1 を与え(3)，(5)を比較すると

$$u_{i_1} / u_{i_f} = V_{i_1 i_f} \cdot (S^{i_f i_1} / S^{i_f}) + \sum_{m=2}^{N-1} \sum_{(i_2 \cdots i_m)}' V_{i_1 i_2} \cdots V_{i_m i_f} \cdot$$

$$\times (S^{i_f i_1 \cdots i_m} / S^{i_f}) = S_{i_f i_1} / S^{i_f} . \qquad (6)$$

但し，$S_{i_f i_1}$ は (i_f, i_1) 要素に対する余因子行列式とする。この関係式は全系の固有エネルギー { E_α } に対して成立するので固有状態 ψ_α に対して i 番目の site の振幅を u_i^α と書くことにする。(6)式は site i_1 から site i_f に到る self-avoiding walk であるから任意の (i_f, i_1) pair に対して成り立つ。別証を Appendix I に示した。(6)より，

$$u_{i_1}^\alpha / u_{i_1'}^{\alpha'} = (u_{i_1}^\alpha / u_{i_f}^\alpha) / (u_{i_1'}^{\alpha'} / u_{i_f}^\alpha)$$

$$= (S_{i_f i_1} / S^{i_f}) / (S_{i_f i_1'} / S^{i_f})$$

$$= S_{i_f i_1}(E_\alpha) / S_{i_f i_1'}(E_\alpha)$$

$$= [G_{i_1 i_f}(E) / G_{i_1' i_f}(E)]_{E=E_\alpha} . \qquad (7)$$

§ 2. 任意次元系に於けるThoulessの exponential decay factor と degree of localization

Thouless の exponential decay factor の定義を高次元系に拡張する。有限系（ $N^d \equiv N_0$; d は系の次元数 ）を考え波動関数が site ℓ の回りに局在しているものとする。Green関数は２点（ j , j′ ）に対して

$$G_{jj'}(E) = S_{j'j}(E) \;/\; S(E) = \sum_{\alpha=1}^{N_0} \frac{u_j^{\alpha}\, \overline{u_{j'}^{\alpha}}}{E - E_{\alpha}} \tag{8}$$

で与えられる。pole $E = E_\beta$ に対する $G_{jj'}(E)$ の留数は

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{c_\beta} G_{jj'}(E)\,dE = u_j^{\beta}\, \overline{u_{j'}^{\beta}} \tag{9}$$

となる。こゝで c_β は pole $E = E_\beta$ のみを囲む Contour とする。任意次元系の exponential decay factor を次の様に定義する。即ち，高次元系の中の一方向に着目し局在の中心 ℓ からの距離がNなる site を i とし

$$\lim_{\substack{N' \to \infty \\ (N \to \infty)}} \ln \sqrt[(N')]{|u_i^{\beta} u_\ell^{\beta}|} \equiv -\lambda_\beta \tag{10}$$

とする（ Fig1 ）。Appendix I より

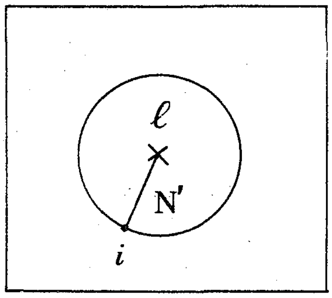

Fig. 1

$$\begin{aligned} -\lambda_\beta &= \lim_{N' \to \infty} \ln \sqrt[(N')]{|u_i^{\beta} u_\ell^{\beta}|} \\ &= \lim_{N' \to \infty} \frac{1}{N'} \left\{ \ln |c_\beta(i,\ell)| + \ln |u_\ell^{\beta}|^2 \right\} \\ &\doteq \lim_{N' \to \infty} \frac{1}{N'} \left\{ \sum_{j=i}^{\ell-1} \ln |c_\beta(j,\ell)/c_\beta(j+i,\ell)| \right. \\ &\qquad \left. + \ln |u_\ell^{\beta}|^2 \right\} \\ &= \lim_{N' \to \infty} \frac{1}{N'} \left\{ \sum_{j=i}^{\ell-1} \ln \left| [G_{j\ell}(E)/G_{j+1\,\ell}(E)]_{E=E_\beta} \right| + \right. \\ &\qquad \left. + \ln |u_\ell^{\beta}|^2 \right\}. \end{aligned} \tag{11}$$

こゝで確率振幅を Norm 1に normalizeしておく。そのとき $\lim_{N' \to \infty} (\frac{1}{N'}) \cdot \ln |u_\ell^{\beta}|$

は 0に近づくことが示される。系が統計的に一様であると仮定して ensemble average をとると

$$-\langle \lambda_\beta \rangle = \langle \ell n \, | \, [\, G_{i\ell}(E) / G_{i+1\,\ell}(E) \,]_{E=E_\beta} \, | \rangle \tag{12}$$

が得られる。同様の結果は境界上の振幅の積の幾何平均の対数によって定義された λ_β に対しても求めることができる(Appendix Ⅱ)。これらの結果は我々の求めている degree of localization の定義と一致する。Thouless の理論は少くとも一次元系に対しては全系の固有関数による exponential decay factor の表現が片側で境界条件を満す解による表現と一致することを示しており,従って Borlandの直観的議論の定量化になっていると考えられる。高次元系に対しては上述の様に λ_β を定義すると我々の結果と一致するのであるから Thouless の定義は degree of localization に一つの解釈を与えていると考えることができる。

Thouless の論文を紹介して下さった松田博嗣先生,興味を示され激励していただいた堀淳一先生, state ratioに関する commentを寄せられた斉藤基彦氏,有益な議論をしていただいた石井,合田両氏に感謝します。

Appendix Ⅰ.

Thouless に従って Green関数の留数を考える。

$$\frac{1}{2\pi i} \oint_{c_\beta} G_{ij}(E)\,dE = u_i^\beta \, \overline{u_j^\beta} = \frac{S_{ji}(\,E_\beta\,)}{\prod_{\alpha(\neq\beta)} (E_\beta - E_\alpha\,)} \tag{13}$$

従って,

$$u_i^\beta \,/\, u_{i'}^\beta = (u_i^\beta \, \overline{u_j^\beta}\,) / (\,u_{i'}^\beta \, \overline{u_j^\beta}\,) = S_{ji}(E_\beta) \,/\, S_{ji'}(\,E_\beta)$$

$$= [\,G_{ij}(E) / \,G_{i'j}(E)\,]_{E=E_\beta} \tag{14}$$

さらに

$$u_i^\beta / u_{i'}^\beta = (u_i^\beta \overline{u_{i'}^\beta}) / (u_{i'}^\beta \overline{u_{i'}^\beta}) = S_{i'i}(E_\beta)/S_{i'i'}(E_\beta)$$

$$= S_{i'i}(E_\beta)/S^{i'}(E_\beta) \qquad (15)$$

従って，

$$u_i^\beta = (S_{i'i}(E_\beta) / S^{i'}(E_\beta))\cdot u_{i'}^\beta$$

$$= \left\{ \sum_{m=p}^{N_0-1} \sum_{\substack{(i_2\cdots i_m)\\ \neq i,\, i'}}' V_{ii_2}V_{i_2i_3}\cdots V_{i_m i'}\cdot\left(S^{i'i_2\cdots i_m i}(E_\beta)/S^{i'}(E_\beta)\right)\right\}$$

$$\times u_{i'}^\beta \equiv c_\beta(i, i')\cdot u_{i'}^\beta \qquad (16)$$

但し，|i−i'|=pとする。故に以下のratioは全て等価である。

$$c_\beta(i, \ell)/c_\beta(i', \ell) = u_i^\beta / u_{i'}^\beta = S_{\ell i}(E_\beta)/S_{\ell i'}(E_\beta)$$

$$= [G_{i\ell}(E)/G_{i'\ell}(E)]_{E=E_\beta} \qquad (17)$$

(別解) M. Saito[7] の証明

固有値方程式を2つの部分に分離する。

$$\left(\begin{array}{c:ccc} \alpha_1 & V_{12} & \cdots & V_{1N} \\ \hdashline V_{21} & \alpha_2 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ V_{N1} & & & \alpha_N \end{array}\right) \left(\begin{array}{c} u_1 \\ \hdashline u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{array}\right) = 0 \qquad (18)$$

$$\begin{pmatrix} \alpha_2 & V_{23} & \cdots & V_{2N} \\ V_{32} & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & & \\ V_{N2} & \cdots & & \alpha_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_2 \\ \vdots \\ u_N \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} V_{21} \\ \vdots \\ V_{N1} \end{pmatrix} u_1 \qquad (19)$$

これを $\{u_2, \cdots, u_N\}$ に関する方程式系とみて u_N について解くと

$$u_N = (-u_1)\cdot \left[\begin{array}{ccc|c} \alpha_2 & \cdots & V_{2N-1} & V_{21} \\ \vdots & \ddots & & \vdots \\ V_{N-12} & & \alpha_{N-1} & V_{N-11} \\ V_{N2} & \cdots & V_{NN-1} & V_{N1} \end{array}\right] \Big/ \det\{\mathbf{S}^{(11)}\} \tag{20}$$

但し，$\mathbf{S}^{(ij)}$ は固有行列式 $\mathbf{S}$ から i 行 j 列を取り除いた行列を表わす。従って

$$u_N/u_1 = (-1)^{N-1}\det\{\mathbf{S}^{(1N)}\} / \det\{\mathbf{S}^{(11)}\} = S_{1N} / S_{11} \tag{21}$$

こゝで Green関数の行列式による表現を考慮して

$$G_{N1} / G_{11} = S_{1N} / S_{11} = u_N / u_1 . \tag{22}$$

但しこの関係は系の固有エネルギー $\{E_i\}$ に対して導出された。これを一般化して

$$G_{nm} / G_{n'm} = u_n(E_i) / u_{n'}(E_i) . \tag{23}$$

Appendix Ⅱ

こゝでは少し見方を変えて境界上の全ての振幅の積を考えその幾何平均の対数として高次元系の exponential decay factor を定義してみよう（Fig2 ）。

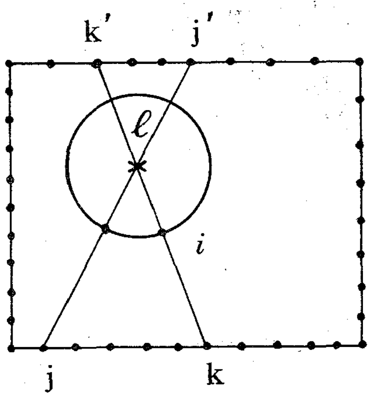

Fig 2.

$$\lim_{N\to\infty} \ln \sqrt[(N_0-1)]{|u_1^{\beta} u_2^{\beta} \cdots u_{2M}^{\beta}|} \equiv -\lambda_{\beta}$$

$$\equiv \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N_0-1} \ln |u_1^{\beta} u_{1'}^{\beta}\ u_2^{\beta} u_{2'}^{\beta} \cdots u_M^{\beta} u_{M'}^{\beta}|$$

$$= \lim_{N\to\infty} \frac{1}{N_0-1} \sum_{j=1}^{M} \ln |u_j^{\beta}\ u_{j'}^{\beta}| \tag{24}$$

但し2Mは境界上の site の総数とし

$$M \equiv d(N-1)^{d-1} \tag{25}$$

こゝで $(j-j')$ path上の site を $\{j_\delta\}$ で表わすと

$$\begin{aligned}
-\lambda_\beta &= \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N_0-1}\sum_{j=1}^{M}\Big\{\sum_{\delta=i}^{\ell-1}\ln|u_{j_\delta}/u_{j_{\delta+1}}| \\
&\quad+\sum_{\delta=\ell+1}^{f}\ln|u_{j_\delta}/u_{j_{\delta-1}}| + \ln|u_\ell^\beta|^2\Big\} \\
&= \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N_0-1}\sum_{j=1}^{M}\Big\{\sum_{\delta=i}^{\ell-1}\ln|G_{j_\delta \ell}/G_{j_{\delta+1}\ell}| \\
&\quad+\sum_{\delta=\ell+1}^{f}\ln|G_{j_\delta \ell}/G_{j_{\delta-1}\ell}| + \ln|u_\ell^\beta|^2\Big\}
\end{aligned} \tag{26}$$

但し，$j_i=j$，$j_\ell=\ell$，$j_f=j'$である。系が統計的に一様であると仮定して ensemble average をとると

$$\begin{aligned}
-\langle\lambda_\beta\rangle &= \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N_0-1}\sum_{j=1}^{M}\Big\{M_j\langle\ln|G_{i\ell}/G_{i+1\ell}|\rangle \\
&\quad+\langle\ln|u_\ell^\beta|^2\rangle\Big\} \\
&= \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N_0-1}\Big\{K\langle\ln|G_{i\ell}/G_{i+1\ell}| \\
&\quad+M\langle\ln|u_\ell^\beta|^2\rangle\Big\}
\end{aligned} \tag{27}$$

但し，M_j は $(j-j')$ path上の site の数とし

$$\sum_{j=1}^{M} M_j \equiv K$$

$$\begin{cases} M_j = N & \text{for 1D system} \\ N \leqq M_j \leqq dN & \text{for higher D system}\end{cases}$$

さらに $N\to\infty$の極限で波動関数の局在の中心 ℓ からの距離の等しい site を i

で表わした (Fig,2)。

$$\lim_{N\to\infty} K / (N_0-1) \equiv c$$

とすると

$$-\langle \lambda_\beta \rangle = c \langle \ln|G_{i\ell}/G_{i+1\ell}| \rangle \tag{28}$$

が得られる。

References

1) D.J. Thouless, preprint.

2) D.Herbert, and R.Jones, J.phys. C: Solid St. Phys. 4, 1145 (1971)

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

4) T.Fujita and J.Hori, preprint

5) A.Herzenberg and A. Modinos, Biopolymers 2, 561 (1964)

6) P.M.Morse and H.Feshbach, " Methods of Theoretical Physics " Vol II.

7) M.Saito, private communication.