Anderson 模型に関連する話題

福島　竜輝
京都大学数理解析研究所

1　導入

Anderson 模型とはランダムなポテンシャル $(V_\omega, \mathbb{P})$ を伴う Schrödinger 作用素

$$H_\omega = -\kappa\Delta + V_\omega \tag{1}$$

のことである．これは欠陥や不純物を含む結晶中での電子の振る舞いを記述するモデルであるため $\mathbb{Z}^d$ や $\mathbb{R}^d$ 上で考えることが多く本講演でもその場合を主に述べるが，他の空間の上で考えてもよい．ただし $\mathbb{Z}^d$ や $\mathbb{R}^d$ 上で考えるときは，V_ω は平行移動不変かつエルゴード的なものを考える．このモデルは物理学者の Anderson [2] によって導入され，不純物の影響が大きいときには周期ポテンシャルの時とは対照的に電子が局在する場合があることが議論されている．

この講演では Anderson の物理的直観にもとづく議論の数学的定式化や，その周辺で発展した理論の一部について解説する．講演者の興味により，かなり放物型の問題に偏った紹介になっていることをはじめにお断りしておく．

2　Anderson 局在の数学的定式化

Anderson 局在の数学的定式化は以下のように述べられる．

Definition. (1) $\sigma(H_\omega)$ の下端付近が固有値のみからなり，対応する固有関数が遠方で指数減衰するとき specrtal localization が起こるという．

(2) $p > 0$ に対して $\sigma(H_\omega)$ の下端に十分近いの区間 I をとれば，任意の台コンパクトな ϕ に対して

$$\mathbb{E}\left[\sup_t \int |x|^p \left|e^{-itH_\omega} 1_I(H_\omega)\phi(x)\right|^2 dx\right] < \infty \tag{2}$$

となるとき，dynamical localization が起こるという．

Remark. より一般に $-\kappa\Delta + V_{\mathrm{per}} + V_\omega$ と周期ポテンシャルも加えると一般にはスペクトルは band 構造を持ち，下端以外の band edge でも上記のような局在が起こることはある．

上の定義の (1) と (2) は論理的には独立である．実は (2) から (1) は固有関数の指数減衰を除けば従うことが知られているが，(1)⇒(2) が成り立たないことは Del Rio, Jitomirskya, Last, Simon [4] にポテンシャルがランダムでない場合の例が述べられている．しかしランダムポテンシャルの場合にこれらの局在を示す二つの主要な方法である Fröhlich-Spencer [5] に始まる multi scale analysis と Aizenman-Molchanov [1] に始まる fractional moment method のいずれかが機能するときは，実際には (2) も成り立つ．詳細は [13, 8] などを参照されたい．また入門的解説としては [9] が非常に良いと思う．上の方法はいずれもレゾルベント $(H_\omega - E)^{-1}$ の指数減衰を示す方法であるが，いずれにしても当初は各点での $V_\omega(x)$ の分布がある程度 regularity を持つことを仮定していたため，基本的な対象の一つであるベルヌーイ分布に適用できないという問題があった．しかし multi scale analysis は 2005 年に [3] によってベルヌーイ分布に適用する方法が発見された．これにより

$\mathbb{Z}^d$ 上で独立同分布の V_ω に対する Anderson 局在の証明は一段落した感があるが，一方で高さではなく配置がランダムな random displacement model などではまだ未解決の問題もある．また，3次元以上で κ が大きいときには絶対連続スペクトルが存在することも予想されているが，これも（長年にわたって）未解決である．

3　放物型の問題

Anderson 模型に対して放物型の問題

$$\partial_t u(t,x) = -H_\omega u(t,x) = \kappa\Delta u(t,x) - V_\omega(x)u(t,x) \tag{3}$$

を考えることもできる．初期値としては $u_0(\cdot) \equiv 1$ または $u_0(\cdot) = \delta_0(\cdot)$ を取ることが多い．この方程式は $\kappa\Delta$ による正則化の効果と V_ω による非正則化の効果の競合がある形になっており，結果的に解 $u(t,\cdot)$ がどのような形状になるかはそれ自体興味深いし，後で述べるように放物型の問題の解析からスペクトルに関する情報を引き出すこともできる．このような問題を初めて考察したのは [7] であり，そこでは Anderson 局在を仮定するとある λ_c 以下のスペクトルは固有値だから

$$u(t,x) = \sum_{\lambda_i<\lambda_c} e^{-t\lambda_i} \langle \phi_i, u_0 \rangle \phi_i(x) + \int_{\lambda_c}^{\infty} e^{-t\lambda} dE_\lambda u_0 \tag{4}$$

と展開できて，右辺第二項は無視できるから解は鋭いピークを重ね合わせたような形状になるという直観が説明されている．もちろん厳密には右辺第一項の和に限っても $\langle \phi_i, u_0 \rangle$ の符号が不明である（一方で解自身は非負である）ことなどから，上の表現から多くを読み取ることはできない．しかし [7] をはじめ多くの論文でこの描像の傍証は示されており，現在まで解の形状を記述する研究が行われてきた．本節ではその研究の流れについて簡単に概観する．なお，以下では簡単のため，とくに断らなければ $\mathbb{Z}^d$ の場合を考えるものとする。

放物型の問題が確率論の研究者の興味を引く一つの理由は，その解が Feynman-Kac 表現

$$u(t,x) = E_x \left[u_0(X_t) \exp\left\{ -\int_0^t V_\omega(X_s) ds \right\} \right] \tag{5}$$

を持つことにある．ここで $((X_s)_{s\ge 0}, P_x)$ は x を出発点とする $\kappa\Delta$-ランダムウォークである．これにより以下に述べるように大偏差原理を用いた解析が可能になるほか，例えば初期値が恒等的に１のとき

$$u(t,0) = \sum_x E_0 \left[\exp\left\{ -\int_0^t V_\omega(X_s) ds \right\} : X_t = x \right] \tag{6}$$

であることに注意すると，Feynman-Kac 公式において主要な貢献をする random walk の路の挙動を調べることにより $u(t,\cdot)$ がどのように分布しているかを理解することができる．

3.1　モーメントの漸近挙動

さて，$u(t,0)$ の挙動を知るためにまずモーメントを調べることは自然であろう．いま $\{V_\omega(x)\}_{x\in\mathbb{Z}^d}$ が独立同分布の場合に $H(t) = \log \mathbb{E}[e^{-tV_\omega(0)}]$ とおくとランダムウォークの経験分布を $L_t(x) =$

$\frac{1}{t}\int_0^t 1_{\{x\}}(X_s)ds$ として

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[u(t,0)] &= \mathbb{E}\otimes E_0\left[\exp\left\{-\int_0^t V_\omega(X_s)ds\right\}\right]\\ &= \mathbb{E}\otimes E_0\left[\exp\left\{-t\left\langle L_t, V_\omega\right\rangle\right\}\right]\\ &= E_0\left[\exp\left\{\sum_x H(tL_t(x))\right\}\right]\end{aligned}\tag{7}$$

と書き直せる．ここで H が凸関数であることに注意すると Jensen の不等式を使って右辺 $\le \exp\{H(t)\}$ が分かるが，一方で左辺において平均を $\{X_s = 0, 0 \le s \le t\}$ に制限することにより $\ge \exp\{H(t) - 2d\kappa t\}$ である．いま例えば $V_\omega(0)$ の分布が下に有界でないとすると $H(t) \gg t$ $(t \to \infty)$ であるから，$\mathbb{E}[u(t,0)]$ の漸近挙動の主要項は $\exp\{H(t)\}$ であることが分かる．これは $u(t,0)$ の主要項が V_ω が非常に大きい値をとっている点を訪れたランダムウォークだけによって決まっていることを示している．しかし主要項だけを見ると $x \neq y$ であっても上と同じ議論で

$$\mathbb{E}[u(t,x)u(t,y)] = \exp\{2H(t)(1+o(1))\}, \quad t\to\infty \tag{8}$$

となってしまうことからも分かるように，$u(t,\cdot)$ の "形状" を知るためにはより高次の漸近挙動を見る必要がある．そこで $\log\mathbb{P}(V_\omega(0)\le r)$ が $r\to-\infty$ における regularity の仮定として，$H(t)$ が $t\to\infty$ においてある $\gamma\ge 0$, 正則変動関数 $\eta(t) = t^{\gamma+o(1)}$, および $\hat{H}$ によって $H(ty) - yH(t) \sim \eta(t)\hat{H}(y)$ と表せるとすると

$$\begin{aligned}\sum_x H(tL_t(x)) &= \sum_x L_t(x)H(t) + [H(tL_t(x)) - L_t(x)H(t)]\\ &\sim H(t) + \sum_x \eta(t)\hat{H}(L_t(x))\end{aligned}\tag{9}$$

と書き直せる．これと Donsker-Varadhan の大偏差原理

$$P_0\left(L_t(\cdot)\approx\phi(\cdot)^2\right) = \exp\left\{-\kappa t\|\nabla\phi\|_2^2(1+o(1))\right\}, \quad t\to\infty \tag{10}$$

をあわせて，いわゆる Laplace 原理（大偏差原理の文脈では Varadhan の補題と呼ばれる）が成り立つとすると

$$\mathbb{E}[u(t,0)] = \exp\left\{H(t) - \inf_{\phi\in\ell^2(\mathbb{Z}^d),\|\phi\|_2=1}\left\{\sum_x \kappa t|\nabla\phi(x)|^2 - \eta(t)\hat{H}(\phi^2(x))\right\}(1+o(1))\right\} \tag{11}$$

となる[1]．さて，実は正則変動関数の一般論から $\hat{H}$ の形は $\rho>0$ を定数として

$$\hat{H}(y) = \rho\begin{cases}\frac{y-y^\gamma}{1-\gamma} & \text{if } \gamma\neq 1,\\ y\log y & \text{if } \gamma = 1\end{cases}\tag{12}$$

に限られることが知られている．この形と適当なスケーリングにより，一般に上の第二項は時間 t の関数と時間に依存しない変分問題の積に書き直すことができる．それが $\gamma>1, <1, =1$ に応じてどのような形になるかは講演の中で述べる．

[1] (10) から (11) にかけてのここでの記述は厳密に言えば記法にも議論にもいろいろと問題がある．技術的な問題点などに関しては，例えば [14] の introduction を参照されたい．

3.2 Lifshitz tail

前小節で議論したモーメントの漸近挙動は H_ω を大きな領域に制限したときのスペクトル分布と密接な関連がある．実際 $\lambda_i^\omega(B(0,N))$ を H_ω の半径 N の球での i 番目に小さい Dirichlet 固有値とすると

$$N(\lambda)=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{|B(0,N)|}\mathbb{E}\left[\#\{\lambda_i^\omega(B(0,N))\le\lambda\}\right]^2$$

で定義される integrated density of states と呼ばれる量の $\inf\sigma(H_\omega)$ 付近での漸近挙動を導くことができる．このためには (3) の基本解を $p_t^\omega(x,y)$ として $\mathbb{E}[u(t,0)]\approx\mathbb{E}[p_t^\omega(0,0)]$ であるという事実を用いる．これは $u(t,\cdot)$ が局在していると信じるならば自然なことである．すると $(V_\omega,\mathbb{P})$ のエルゴード性から

$$\begin{aligned}\mathbb{E}[p_t^\omega(0,0)]&=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{|B(0,N)|}\sum_{x\in B(0,N)}p_t^\omega(x,x)\\&=\lim_{N\to\infty}\frac{1}{|B(0,N)|}\sum_{x\in B(0,N)}\sum_{i=1}^{\infty}e^{-\lambda_i^\omega(B(0,N))t}|\phi_i^\omega(x)|^2dx\\&=(\mathscr{L}N)(t)\end{aligned}$$

となるから N の Laplace 変換の遠方での漸近挙動が分かっていることになる．したがって粗っぽく言えば Tauber 型定理により，$N(\lambda)$ の λ が小さいときの漸近挙動が分かるわけである[3]．とくに一般に Lifshitz tail effect と呼ばれる，状態密度が基底状態付近で指数的に希薄になっている現象が観察され，このことは Anderson 局在を示す multi scale analysis における一つのステップとして使われる.（状態密度のオーダーは，例えば $V_\omega(0)$ が $[0,1]$ 上の一様分布の場合 $\exp\{-c\lambda^{-d/2}\}$, $\lambda\downarrow 0$ である.）

さらに integrated density of states の定義から直ちに従う

$$\mathbb{P}(\lambda_1^\omega(B(0,N))\le\lambda)\lesssim|B(0,N)|N(\lambda) \tag{13}$$

は次の小節で見るように $u(t,0)$ の ω 毎の漸近挙動の解析においても重要な役割を果たす.

3.3 ω 毎の漸近挙動

まず $B_t=B(0,t(\log t)^2)$ とする．これぐらい大きくとっておけば,（多くの V_ω に対して）Feynman-Kac 表現において B_t を脱出するランダムウォークの貢献は無視できることが分かる．従って

$$u(t,0)\approx E_0\left[\exp\left\{-\int_0^t V_\omega(X_s)ds\right\}:X_{[0,t]}\subset B_t\right] \tag{14}$$

であるが，この右辺は B_t の外に Dirichlet 条件を課した放物型問題の解であるから固有関数展開により

$$u(t,0)\approx\exp\left\{-t\lambda_1^\omega(B_t)\right\} \tag{15}$$

となる．つまり $\lambda_1^\omega(B_t)$ の漸近挙動を調べればよいことになった訳だが，下からの評価は (13) から簡単に得られる．実際そこで $N=t(\log t)^2$ ととって λ_t を (13) の右辺が $t\in\mathbb{N}$ で総和可能な程度にとれば Borel-Cantelli の第一補題により十分大きい t に対して (13) $\ge\lambda_t$ が従う（例えば $V_\omega(0)$ が $[0,1]$ 上の一様分布の場合 $\lambda_t\approx c'(\log t)^{-2/d}$, $t\to\infty$ とでき，よって $u(t,0)\lesssim\exp\{-c't/(\log t)^{2/d}\}$）.

[2] 実は平均をとらずに極限をとっても同じ値に収束する.
[3] ここで λ が小さいというのは $\inf\sigma(H_\omega)$ に近いという意味である.

次に $\lambda_1^\omega(B_t)$ の上からの評価であるが，技術的にいろいろと面倒な部分が多いのでここではアイデアだけを述べる．なお以下の議論は少なくとも V_ω に強い混合性を要求するので，簡単のため $\mathbb{Z}^d$ 上独立とする．上の (15) を $\mathbb{P}$ で積分すると $\mathbb{E}[u(t,0)] \approx \mathbb{E}[\exp\{-t\lambda_1^\omega(B_t)\}]$ となるから，モーメントの漸近挙動は $\lambda_1^\omega(B_t)$ の Laplace 変換のそれに対応している．従ってここから $\mathbb{P}(\lambda_1^\omega(B(0,R_t) \le \lambda_t)$ という形の大偏差の確率が下から評価できると思うのはそう不自然なことではなく，結果的には (13) を反転したものになる[4]．ただし R_t は V_ω の法則に依って決めるもので，典型的には $\log t$ の冪である．いま独立性を仮定したから，B_t を一辺が R_t の（超）立方体に分割して Borel-Cantelli の第二補題を使えば，少なくとも一つの立方体で $\lambda_1^\omega(B(x,R_t) \le \lambda_t$ となる λ_t の限界が分かる．$\lambda_1^\omega(B_t) \le \lambda_1^\omega(B(x,R_t))$ に注意すれば，これが上からの評価を与える．

以上の議論は（とくに後半が）場当たり的に見えるかもしれないが，多くの場合に上下の評価は一致して $u(t,0)$ の ω 毎の漸近挙動が決定される．これはとくに驚くようなことではなく，途中で述べたように (13) は実はほぼ等号であるということの反映に過ぎない．結果を almost sure の形にするために分割して Borel-Cantelli を使えるようにしているのである．しかし一方で空間を分割して "良い場所" を探す方法で $u(t,0)$ の良い下からの評価が得られるということは，Gärtner-Molchanov の述べた解がピークからなるという描像を支持していると考えられる．

4　スペクトル順位統計と一点への局在

最後に比較的最近の話題としてスペクトル順位統計とその応用について述べよう．Anderson 模型について integrated density of states の定義におけるように領域 Λ に制限して無限体積極限をとったときに，固定した E の近傍にどれぐらいの数の固有値が含まれ，どのような揺らぎを持つかは古くから興味を持たれており，[11, 10] では E を Anderson 局在が起こっておりかつ $n(\lambda) = \frac{d}{d\lambda}N(\lambda)$ が存在する点に取った場合には Λ の体積でスケーリングした点過程

$$\sum_i \delta_{|\Lambda|(\lambda_i^\omega(\Lambda)-E)}(dx) \tag{16}$$

が $n(\lambda)dx$ を強度とする Poisson 点過程に収束することが示されている[5]．ここで Poisson になる理由は非常に大雑把に言うと

- 異なる i に対する $\lambda_i^\omega(\Lambda)$ には異なる点に局在した固有関数に対応しており，従ってそれらはほぼ独立であること，
- 固定した E の近くにある固有値の分布はほぼ一様であること，

の二つの事実による．さらに [12] 及び関連する論文では同様に取った E に対して，固有値と固有関数の "局在中心" を結合した点過程を考えて，それが $\mathbb{R} \times \mathbb{R}^d$ 上の Poisson 点過程に収束することまで示されている．従ってとくに十分大きな領域をとると，その中には電子が局在し易い場所が体積オーダーで存在する．この方向の研究は最近急速に進んでおり，例えば数理解析研究所講究録別冊 B27: Spectra of Random Operators and Related Topics にはサーベイを含めて多くの結果が述べられている．

[4] もちろん Laplace 変換と呼んでいるところで B_t の半径とパラメータ t が特殊な関係になってしまっているので直接は言えないし，仮にパラメータが自由にとれたとしても一般に Laplace 変換と大偏差確率の下からの評価の関係はデリケートである．

[5] 正確には [10] では Aizenman-Molchanov の局在の証明に現れる Green 関数の分数冪モーメントの指数減衰を仮定している．

ところでこの動きとは独立に，最近 Biskup-König は放物型の問題に関してスペクトル順位統計を使って非常に精密な結果を示したと主張しているので，最後に簡単にそれを紹介する．設定は $\mathbb{Z}^d$ 上の独立同分布な V_ω で，各点では double exponential 分布

$$\mathbb{P}(V_\omega(0) \le r) \sim \exp\{-\exp\{-r\}\}, \quad r \to -\infty \tag{17}$$

を持つというものである．このクラスに対しては実は [6] において Gärtner-Molchanov の描像はある意味で証明されている．具体的には ω 毎に B_t の中には $t^{o(1)}$ 程度の個数の V_ω が非常に小さな値をとっている "谷" があって，$u(t,\cdot)$ はほとんどそれらの谷に集中しているという結果である．彼らの議論は Feynman-Kac 表現を活用しており，符号がコントロールできない固有関数を使う代わりにそれぞれの谷にたどり着くまではランダムウォークを使って議論し，到着したあとは Markov 性で一旦切って局所的な固有値，固有関数の情報を使うというものである．この部分については講演でもう少し詳細を補足したい．

Biskup-König はこの結果を，実際には一つの谷にほとんど集中しているという形に強めた．彼らはまず $B_L := B(0,L)$ 内に制限した H_ω の固有値 $\{\lambda_i^\omega(B_L)\}_{i\in\mathbb{N}}$ と対応する固有関数の "局在中心" $\{X_i^\omega(B_L)\}_{i\in\mathbb{N}}$ からなる点過程

$$\sum_i \delta_{(\lambda_i^\omega(B_L)+\log\log L)\log L,\, X_i^\omega(B_L)/L)}(du,dx) \tag{18}$$

が $\mathbb{R}\times B(0,1)$ 上の特性測度が $e^u du \otimes dx$ の Poisson 点過程に収束することをまず示した．ここで $-\log\log L$ は B_L 内における V_ω の最小値のオーダーであり，従ってこれはスペクトルの端点付近でのスペクトル順位統計になっている．第 3 節で述べた通り放物型の問題では $\inf\sigma(H_\omega)$ 付近の固有値の情報が重要なので，このように動く基準点をとってその周辺を見る方が自然なのである．これによってとくに最小固有値付近では隣接する固有値に $1/\log L$ のギャップがあることが分かり，それを用いて彼らは局在点を一点まで絞れることを示した．

参考文献

[1] M. Aizenman and S. Molchanov. Localization at large disorder and at extreme energies: an elementary derivation. *Comm. Math. Phys.*, 157(2):245–278, 1993.

[2] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, Mar 1958.

[3] J. Bourgain and C. E. Kenig. On localization in the continuous Anderson-Bernoulli model in higher dimension. *Invent. Math.*, 161(2):389–426, 2005.

[4] R. del Rio, S. Jitomirskaya, Y. Last, and B. Simon. Operators with singular continuous spectrum. IV. Hausdorff dimensions, rank one perturbations, and localization. *J. Anal. Math.*, 69:153–200, 1996.

[5] J. Fröhlich and T. Spencer. Absence of diffusion in the Anderson tight binding model for large disorder or low energy. *Comm. Math. Phys.*, 88(2):151–184, 1983.

[6] J. Gärtner, W. König, and S. Molchanov. Geometric characterization of intermittency in the parabolic Anderson model. *Ann. Probab.*, 35(2):439–499, 2007.

[7] J. Gärtner and S. A. Molchanov. Parabolic problems for the Anderson model. I. Intermittency and related topics. *Comm. Math. Phys.*, 132(3):613–655, 1990.

[8] D. Hundertmark. A short introduction to Anderson localization. In *Analysis and stochastics of growth processes and interface models*, pages 194–218. Oxford Univ. Press, Oxford, 2008.

[9] W. Kirsch. An invitation to random Schrödinger operators. In *Random Schrödinger operators*, volume 25 of *Panor. Synthèses*, pages 1–119. Soc. Math. France, Paris, 2008. With an appendix by Frédéric Klopp.

[10] N. Minami. Local fluctuation of the spectrum of a multidimensional Anderson tight binding model. *Comm. Math. Phys.*, 177(3):709–725, 1996.

[11] S. A. Molčanov. The local structure of the spectrum of the one-dimensional Schrödinger operator. *Comm. Math. Phys.*, 78(3):429–446, 1980/81.

[12] F. Nakano. Distribution of localization centers in some discrete random systems. *Rev. Math. Phys.*, 19(9):941–965, 2007.

[13] P. Stollmann. *Caught by disorder*, volume 20 of *Progress in Mathematical Physics*. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, 2001. Bound states in random media.

[14] R. van der Hofstad, W. König, and P. Mörters. The universality classes in the parabolic Anderson model. *Comm. Math. Phys.*, 267(2):307–353, 2006.