

再帰グリーン関数法

山影 相

2013年7月31日

概要

再帰グリーン関数 (recursive Green's function) 法の定式化についてのノート.

1 再帰関係式の導出

ハミルトニアンを

$$H = \sum_{\mathbf{n}\mathbf{m}\alpha\beta} c_{\mathbf{n}\alpha}^\dagger t_{\mathbf{n}\alpha;\mathbf{m}\beta} c_{\mathbf{m}\beta} = \sum_{\mathbf{n}\mathbf{m}} c_{\mathbf{n}}^\dagger t_{\mathbf{n}\mathbf{m}} c_{\mathbf{m}} \quad (1)$$

と表しておく. ここで \mathbf{n}, \mathbf{m} は格子点の位置を表すベクトルであり, α, β はそれ以外の自由度 (スピンなど) を表す指標である. ここから一次元的な描像で考えていく. すなわち, z 方向の位置を $i \in \mathbb{Z}$ で表し, これに直交する方向は内部自由度とみなす. ハミルトニアンは

$$H = \sum_{ij\mathbf{n}_\parallel\mathbf{m}_\parallel} c_{(i,\mathbf{n}_\parallel)}^\dagger t_{(i,\mathbf{n}_\parallel)(j,\mathbf{m}_\parallel)} c_{(j,\mathbf{m}_\parallel)} = \sum_{ij} c_i^\dagger t_{ij} c_j \quad (2)$$

と表される. さらに, 簡単のために t_{ij} は最近接のみを考えることにする.

$$H = \sum_i c_i^\dagger \epsilon_i c_i + \sum_i \left(c_i^\dagger t_i c_{i+1} + \text{h.c.} \right) \quad (3)$$

ここで $\epsilon = t_{ii}$, $t_i = t_{i(i+1)}$. なお, 次近接以上の t_{ij} がある系への拡張も可能である. 例えば次近接との跳び移りがある場合には 2 列をまとめて 1 列と読み直せばよい.

グリーン関数は

$$G(z) = \frac{1}{z - H} \quad (4)$$

と定義される. 格子点が $1 \leq i \leq N_{\perp}$ なら $gN_{\parallel}N_{\perp}$ 次の正方行列である. ここで g は内部自由度の数であり, N_{\parallel} は面内の格子点の数.

まず $1 \leq i \leq l$ の格子点のみ存在する左半有限系での終端におけるグリーン関数

$$G_l^{(L)}(z) = \langle l | \left(z - H_l^{(L)} \right)^{-1} | l \rangle \quad (5)$$

$$H_l^{(L)} = \sum_{i,j \leq l} c_i^{\dagger} t_{ij} t_j \quad (6)$$

を考える (これらは gN_{\parallel} 次元行列). これを t_{l-1} に関して展開すると

$$G_{l,l}^{(L)} = g_l + g_l t_{l-1}^{\dagger} G_{l-1}^{(L)} t_{l-1} g_l + \dots = \frac{1}{g_l^{-1} - t_{l-1}^{\dagger} G_{l-1}^{(L)} t_{l-1}} \quad (7)$$

となる. $g_l(z)$ は $i = l$ の 1 列のみが存在するときのグリーン関数であり,

$$g_l(z) = \frac{1}{z - H_l} \quad (8)$$

$$H_l = c_l^{\dagger} \epsilon_l c_l \quad (9)$$

である.

同様にして, $r \leq i \leq N_{\perp}$ で定義される右半有限系の終端におけるグリーン関数 $G_r^{(R)}(z)$ が

$$G_r^{(R)} = \frac{1}{g_r^{-1} - t_r G_{r+1}^{(R)} t_r^{\dagger}} \quad (10)$$

で与えられる.

これらをまとめると, もともとのグリーン関数の対角成分は

$$G_{i,i} = \frac{1}{G_{i,i}^{(L)-1} - t_i G_{i+1}^{(R)} t_i^{\dagger}} \quad (11)$$

$$= \frac{1}{G_{i,i}^{(R)-1} - t_{i-1}^{\dagger} G_{i-1}^{(L)} t_{i-1}} \quad (12)$$

と求められる.

また, 非対角成分は

$$\begin{aligned} G_{i,i+1} &= G_i^{(L)} t_i G_{i+1}^{(R)} + G_i^{(L)} t_i G_{i+1}^{(R)} t_i^{\dagger} G_i^{(L)} t_i G_{i+1}^{(R)} + \dots \\ &= G_{i,i} t_i G_{i+1}^{(R)} \end{aligned} \quad (13)$$

$$= G_i^{(L)} t_i G_{i+1,i+1} \quad (14)$$

および

$$\begin{aligned} G_{i+1,i} &= G_{i+1}^{(R)} t_i^\dagger G_i^{(L)} + G_{i+1}^{(R)} t_i^\dagger G_i^{(L)} t_i G_{i+1}^{(R)} t_i^\dagger G_i^{(L)} + \dots \\ &= G_{i+1,i+1} t_i^\dagger G_i^{(L)} \end{aligned} \quad (15)$$

$$= G_{i+1}^{(R)} t_i^\dagger G_{i,i} \quad (16)$$

2 半無限系におけるグリーン関数

バルクな系の表面を議論するには $G_\infty^{(L)}$ を求める必要がある。これは次の議論のように計算できる。^{*1} まず一般化された共形変換を

$$A.G = (A_{11}G + A_{12})(A_{21}G + A_{22})^{-1} \quad (17)$$

により定義する。 A と G は行列であり、

$$A = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad (18)$$

である。 A_{ij} も行列であり、その次元は G の次元と同じである。この変換は

$$A.(B.G) = (AB).G \quad (19)$$

という関係式を満たす。

前節から

$$G_l^{(L)} = \frac{1}{g_l^{-1} - t_{l-1}^\dagger G_{l-1}^{(L)} t_{l-1}} \quad (20)$$

であるが、これを

$$G_l^{(L)} = X_{l-1}.G_{l-1}^{(L)} \quad (21)$$

$$X_{l-1} = \begin{pmatrix} 0 & t^{-1} \\ -t^\dagger & g_l^{-1} t^{-1} \end{pmatrix} \quad (22)$$

と表すことができる。これを繰り返すと

$$G_l^{(L)} = (X_{l-1} X_{l-2} \dots X_1).G_1^{(L)} \quad (23)$$

となる。

^{*1} A. Umerski, Phys. Rev. B, **55**, 5266 (1997).

さて、並進対称な形を考えよう。このとき、 X_l は l に依存しない。これを $X_l = X$ と書くことにすると

$$G_l^{(L)} = X^{l-1} \cdot G_1^{(L)} \quad (24)$$

である。非エルミート行列 X を対角化する。固有値を $\lambda_1, \dots, \lambda_{2M}$ とし、その順序は $|\lambda_1| < |\lambda_2| < \dots < |\lambda_{2M}|$ となるようにする。この順序づけは $\text{Im } z > 0$ であれば可能である。対応する右固有ベクトル \mathbf{u}_i を並べた行列を

$$U = (\mathbf{u}_1, \dots, \mathbf{u}_{2M}) \quad (25)$$

とすると、

$$U^{-1} X U = \Lambda = \text{diag}(\Lambda_1, \Lambda_2) \quad (26)$$

となっている。ゆえに

$$G_l^{(L)} = (U \Lambda^{l-1} U^{-1}) \cdot G_1^{(L)} = U \cdot \left[\Lambda^{l-1} \cdot (U^{-1} \cdot G_1^{(L)}) \right] = U \cdot \left[\Lambda_1^{l-1} (U^{-1} \cdot G_1^{(L)}) \Lambda_2^{1-l} \right] \quad (27)$$

となる。ここで、 $|\lambda_1| < \dots < |\lambda_{2M}|$ を思い起こすと、

$$G_\infty^{(L)} = U \cdot 0 = U_{12} (U_{22})^{-1} \quad (28)$$

と求めることができる。

例として、一次元鎖

$$H = -t \sum_i c_i^\dagger c_{i+1} + \text{h.c.} \quad (29)$$

を考える。

$$X = \begin{pmatrix} 0 & -1/t \\ t & -z/t \end{pmatrix} \quad (30)$$

の固有値は

$$\lambda_\pm = -\frac{z}{2t} \pm \sqrt{\frac{z^2}{4t^2} - 1} \quad (31)$$

であり、対応する固有ベクトルは

$$\mathbf{u}_\pm \propto \left(\frac{z}{2t} \pm \sqrt{\frac{z^2}{4t^2} - 1}, t \right)^T \quad (32)$$

である. $|z| > 2t$ のとき, 固有ベクトルは実であり, 状態密度は零であることが分かる. 一方, $|z| < 2t$ では,

$$G_{\infty}^{(L)} = \frac{z}{2t^2} - \sqrt{\frac{z^2}{4t^4} - \frac{1}{t^2}} \quad (33)$$

つまり, 表面状態密度は

$$\rho_{\infty}^{(L)}(\omega) = \frac{1}{\pi t} \sqrt{1 - \frac{\omega^2}{4t^2}} \quad (34)$$

と与えられる.

付録 A ライブラリ解説

A.1 半無限系におけるグリーン関数

`void semi_inf(int dim, Complex z, Complex* epsilon, Complex* t, Complex* g)`

半無限系のハミルトニアン

$$H = \sum_{-\infty \leq i \leq 0} \left(c_i^{\dagger} \epsilon c_i + c_i^{\dagger} t c_{i+1} + c_i t^{\dagger} c_{i-1} \right) \quad (35)$$

の終端 $i = 0$ におけるグリーン関数行列

$$G_{\infty}^{(L)}(z) = \langle i = 0 | (z - H)^{-1} | i = 0 \rangle \quad (36)$$

を求める.

表 1 `semi_inf` の入力

引数	説明	型
<code>dim</code>	行列 ϵ, t の次元	<code>int</code>
<code>z</code>	複素振動数 z	<code>double complex</code>
<code>epsilon</code>	行列 ϵ	<code>double complex</code> 配列
<code>t</code>	行列 t	<code>double complex</code> 配列

表 2 semi.inf の出力

引数	説明	型
g	行列 $G_{\infty}^{(L)}(z)$	double complex 配列

A.2 グリーン関数の漸化式

void gleft(int dim, Complex z, Complex* epsilon, Complex* t, Complex* g0, Complex* g1)

$$G_l^{(L)}(z) = \frac{1}{g_l^{-1}(z) - t_{l-1}^{\dagger} G_{l-1}^{(L)}(z) t_{l-1}}$$

を計算する.

表 3 gleft の入力

引数	説明	型
dim	行列 $t_{l-1}^{\dagger}, G_{l-1}^{(L)}, t_{l-1}$ の次元	int
z	複素振動数 z	double complex
epsilon	行列 ϵ_l	double complex 配列
t	行列 t_{l-1}	double complex 配列
g0	行列 $G_{l-1}^{(L)}$	double complex 配列

表 4 gleft の出力

引数	説明	型
g1	行列 $G_l^{(L)}$	double complex 配列