再帰グリーン関数法

山影　相

2013 年 4 月 8 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

$$H = \sum_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{m}\alpha\beta} c^\dagger_{\boldsymbol{n}\alpha} t_{\boldsymbol{n}\alpha;\boldsymbol{m}\beta} c_{\boldsymbol{m}\beta} = \sum_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{m}} c^\dagger_{\boldsymbol{n}} t_{\boldsymbol{n}\boldsymbol{m}} c_{\boldsymbol{m}} \tag{1}$$

と表しておく．ここで $\boldsymbol{n}$, $\boldsymbol{m}$ 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

$$H = \sum_{ij\boldsymbol{n}_\parallel \boldsymbol{m}_\parallel} c^\dagger_{(i,\boldsymbol{n}_\parallel)} t_{(i,\boldsymbol{n}_\parallel)(j,\boldsymbol{m}_\parallel)} c_{(j,\boldsymbol{m}_\parallel)} = \sum_{ij} c^\dagger_i t_{ij} c_j \tag{2}$$

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．

$$H = \sum_i c^\dagger_i \epsilon_i c_i + \sum_i \left(c^\dagger_i t_i c_{i+1} + \mathrm{h.c.} \right) \tag{3}$$

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

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

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

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

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

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

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

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，

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

$$H_l = c_l^\dagger \epsilon_l c_l \tag{9}$$

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 $G_r^{(\mathrm{R})}(z)$ が

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

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

$$\begin{aligned} G_{i,i} &= \frac{1}{G_{i,i}^{(\mathrm{L})-1} - t_i G_{i+1}^{(\mathrm{R})} t_i^\dagger} && (11) \\ &= \frac{1}{G_{i,i}^{(\mathrm{R})-1} - t_{i-1}^\dagger G_{i-1}^{(\mathrm{L})} t_{i-1}} && (12) \end{aligned}$$

と求められる．

また，非対角成分は

$$\begin{aligned} G_{i,i+1} &= G_i^{(\mathrm{L})} t_i G_{i+1}^{(\mathrm{R})} + G_i^{(\mathrm{L})} t_i G_{i+1}^{(\mathrm{R})} t_i^\dagger G_i^{(\mathrm{L})} t_i G_{i+1}^{(\mathrm{R})} + \cdots \\ &= G_{i,i} t_i G_{i+1}^{(\mathrm{R})} && (13) \\ &= G_i^{(\mathrm{L})} t_i G_{i+1,i+1} && (14) \end{aligned}$$

および

$$
\begin{aligned}
G_{i+1,i} &= G_{i+1}^{(\mathrm{R})} t_i^\dagger G_i^{(\mathrm{L})} + G_{i+1}^{(\mathrm{R})} t_i^\dagger G_i^{(\mathrm{L})} t_i G_{i+1}^{(\mathrm{R})} t_i^\dagger G_i^{(\mathrm{L})} + \cdots \\
&= G_{i+1,i+1} t_i^\dagger G_i^{(\mathrm{L})} && (15) \\
&= G_{i+1}^{(\mathrm{R})} t_i^\dagger G_{i,i} && (16)
\end{aligned}
$$

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 $G_\infty^{(\mathrm{L})}$ を求める必要がある．これは次の議論にように計算できる．[*1] まず一般化された共形変換 . を

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

により定義する．A と G は行列であり，

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

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

$$
A.(B.G) = (AB).G \tag{19}
$$

という関係式を満たす.

前節から

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

であるが，これを

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

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

と表すことができる．これを繰り返すと

$$
G_l^{(\mathrm{L})} = (X_{l-1} X_{l-2} \cdots X_1).G_1^{(\mathrm{L})} \tag{23}
$$

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

$$G_l^{(\mathrm{L})} = X^{l-1}.G_1^{(\mathrm{L})} \tag{24}$$

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

$$U = (\boldsymbol{u}_1, \cdots, \boldsymbol{u}_{2M}) \tag{25}$$

とすると，

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

となっている．ゆえに

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

となる．ここで，$|\lambda_1| < \cdots < |\lambda_{2M}|$ を思い起こすと，

$$G_\infty^{(\mathrm{L})} = U.0 = U_{12}(U_{22})^{-1} \tag{28}$$

と求めることができる．

例として，一次元鎖

$$H = -t \sum_i c_i^\dagger c_{i+1} + \mathrm{h.c.} \tag{29}$$

を考える．

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

の固有値は

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

であり，対応する固有ベクトルは

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

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，

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

つまり，表面状態密度は

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

と与えられる．