再帰グリーン関数法

山影　相

2015 年 6 月 15 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．

目次

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．

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

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

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

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

と求められる．

また，非対角成分は

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

および

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

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が，$G_i^{(\mathrm{L})}$ を十分に大きな i まで計算する，という方法は多大な計算時間がかかるという問題がある．これを解決するために，まず Umerski による半無限極限におけるグリーン関数の計算法を述べ,[*1]また，宮田らによって改善された方法を説明する．

2.1　Umerski の方法

まず一般化された共形変換 . を

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

により定義する．A と G は行列であり，

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

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

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

という関係式を満たす．

[*1] A. Umerski, Phys. Rev. B, **55**, 5266 (1997).

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．

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，

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

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．

2.2 シュール分解を用いた方法

多くの問題では上に述べた方法により表面グリーン関数を求めることができる．例外は $\det t \approx 0$ となる場合である．このとき，t^{-1} の数値誤差が巨大になり，行列 X の対角化はほとんど不可能である．こうした状況は第一原理計算から導出された格子模型において現れる．そのハミルトニアンは長距離の跳び移りを含んでいるはずである．例えば，第 3 近接まで取り入れると，ハミルトニアンは

$$\hat{\epsilon} = \begin{pmatrix} \epsilon & t_1 & t_2 \\ t_1^\dagger & \epsilon & t_1 \\ t_2^\dagger & t_1^\dagger & \epsilon \end{pmatrix}, \ \hat{t} = \begin{pmatrix} t_3 & 0 & 0 \\ t_2 & t_3 & 0 \\ t_1 & t_2 & t_3 \end{pmatrix}, \tag{35}$$

と決めることになる．しかし，一般に長距離になるほど跳び移りは小さくなるから，$|\det t_1| \gg |\det t_2| \gg |\det t_3|$ であり，$\det \hat{t} = \det t_3^3 \sim 0$ と，行列式が極めて小さくなることがある．

そこで，t に対して逆行列を求めるのではなく，もっと後の段階，例えば U を求めるのに相当する段階で逆行列をとるようにすれば，この数値誤差が軽減することが期待される．こういった取り扱いはシュール分解[*2]を用いて以下のように実行できる．

まず，次の 2 つの行列を定義する．

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \hat{t} \end{pmatrix},\ A_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\hat{t}^\dagger & \hat{g}^{-1} \end{pmatrix}, \tag{36}$$

ここで，$\hat{g}^{-1} = z - \hat{\epsilon}$ であるから，上の 2 つの行列においては逆行列を何も用いていない．これらを用いて行列 X が

$$X = A_2 A_1^{-1}, \tag{37}$$

と表される．この対角化をするために，A_1 と A_2 をシュール分解する：

$$A_1 = Q_1 R_1 Q_2^\dagger, \tag{38}$$

$$A_2 = Q_1 R_2 Q_2^\dagger, \tag{39}$$

シュール形式 R_1 と R_2 は共に上三角行列であり，Q_1 と Q_2 はユニタリー行列である．上式から直ちに $A_2 A_1^{-1}$ と $R_2 R_1^{-1}$ の固有値は同じであることが分かる．また，$R_2 R_1^{-1}$ の固有ベクトルを $\boldsymbol{v}$ とすると，対応する $A_2 A_1^{-1}$ の固有ベクトルは

$$\boldsymbol{u} = Q_1 \boldsymbol{v}, \tag{40}$$

によって与えられる．このようにして，$\hat{t}$ の逆行列を計算する代わりに R_1 の逆行列を求めることで X の対角化を実行できる．後の議論は式 (25) 以降と同様である．

[*2] T. Miyata, S. Honda, R. Naito, and S.-L. Zhang, Jpn. J. Ind. Appl. Math. **30** 653 (2013); T. Miyata, R. Naito, and S. Honda, J. Eng. Math. (2015).