apack の使い方

山影　相

2015 年 6 月 15 日

目次

1　コンパイルについて

apack.cpp に関数が定義してある．

main のソースファイル名を hoge.cpp とする．ここから apack.cpp 内の関数を呼び出したい．そのために，hoge.cpp と apack.cpp をコンパイル，リンクすれば良い．MKL を使う場合には以下のようになる：

$ icc hoge.cpp apack.cpp -lmkl_intel_ilp64 -lmkl_core -lmkl_sequential -lpthread -lm

apack.zip 内には各関数の使用例がある．

$ make

とすると，コンパイルされる．apack.cpp 内で定義される関数は表 1 にまとめられている．

表 1　apack において定義されている関数の一覧.

番号	関数	説明
1	hmlt1d	有限鎖のハミルトニアンをつくる.
2	bddg	エネルギーバンド図のためのデータを出力する.
3	semi_inf	半無限空間におけるグリーン関数を求める.
4	sgfqz	一般化シュール分解（QZ 分解）を用いて 半無限空間におけるグリーン関数を求める.
5	gleft	グリーン関数の漸化式.

2　関数の解説

2.1　有限鎖のハミルトニアンを代入する関数 hmlt1d

`void hmlt1d(std::complex`$\langle$`double`$\rangle$ $*a$, `int` N, `int` g,
`std::complex`$\langle$`double`$\rangle$ $*\epsilon$, `std::complex`$\langle$`double`$\rangle$ $*t$, `int` b)

有限鎖 (N サイト) のハミルトニアン

$$H = \sum_{n=1}^{N} c_n^\dagger \epsilon c_n + \sum_{n=1}^{N} \left(c_n^\dagger t c_{n+1} + \text{h.c.} \right) + b \times c_N^\dagger t c_1 + \text{h.c.}$$
$$\rightarrow \begin{pmatrix} \epsilon & t & 0 & \cdots & 0 & bt^\dagger \\ t^\dagger & \epsilon & t & \ddots & & 0 \\ 0 & t^\dagger & \epsilon & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & & & & & t \\ bt & 0 & \cdots & 0 & t^\dagger & \epsilon \end{pmatrix} \tag{1}$$

を a に代入する．ただし，最近接の跳び移りのみを扱っている．g は内部自由度の数であり，ϵ と t は $g \times g$ 行列である．$b = 0$ は開放境界，$b = 1$ は周期境界，$b = -1$ は反周期境界を表す.

hmlt1d.cpp は

$$\epsilon = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 3 & 4 \end{pmatrix},\ t = \begin{pmatrix} 5 & 6 \\ 7 & 8 \end{pmatrix}, \tag{2}$$

の場合のハミルトニアンをつくり，それを表示する例題である.

表 2　hmlt1d の入出力

引数	説明	型
a	ハミルトニアン行列	$(gN)^2$ 成分 double complex
N	サイト数	int
g	内部自由度の数	int
ϵ	オンサイトエネルギー	g^2 成分 double complex
t	ホッピング	g^2 成分 double complex
b	境界条件	int

2.2　エネルギーバンド図のためのデータを出力する関数 bddg

`void bddg(const char *name, void (*hmlt)(std::complex⟨double⟩*, double, double, double), int d, double *kp, int np, int nk)`

$d \times d$ ハミルトニアン行列 $H(k_x, k_y, k_z)$ の固有値を n_p 個の点 $k_p = \{\mathbf{\Gamma}^{(1)}, \cdots, \mathbf{\Gamma}^{(n_p)}\}$, $\mathbf{\Gamma}^{(i)} = (\Gamma_x^{(i)}, \Gamma_y^{(i)}, \Gamma_z^{(i)})$ に沿って求め，出力する．出力されたデータファイル "name"はそのまま gnuplot で描画できる形式になっている．各区間の運動量の分割数は n_k．k_p は 1 次元配列として { $\Gamma_x^{(1)}$, $\Gamma_y^{(1)}$, $\Gamma_z^{(1)}$, $\Gamma_x^{(2)}$, $\Gamma_y^{(2)}$, $\Gamma_z^{(2)}$, $\cdots$, $\Gamma_x^{(n_p)}$, $\Gamma_y^{(n_p)}$, $\Gamma_z^{(n_p)}$} という形式である．

なお, あらかじめ, ハミルトニアンを配列 a に代入する `void hmlt(std::complex⟨double⟩ *`a`, double `k_x`, double `k_y`, double `k_z`)` を定義しておく必要がある．

bddg.cpp は

$$H(k_x, k_y, k_z) = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon(k_x, k_y, k_z) \\ \epsilon(k_x, k_y, k_z) & 0 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

$$\epsilon(k_x, k_y, k_z) = -2\cos k_x - 2\cos k_y - 2\cos k_z, \tag{4}$$

のエネルギーバンド図を $R(\pi,\pi,\pi)$–$X(\pi,0,0)$–$\Gamma(0,0,0)$–$M(\pi,\pi,0)$–$R(\pi,\pi,\pi)$–$\Gamma(0,0,0)$–$X(\pi,0,0)$–$M(\pi,\pi,0)$ に沿って描くためのデータファイル "test.dat"を出力する例題である．gnuplot で `plot "test.dat"`とすれば描画できる．

表 3　bddg の入出力

引数	説明	型
name	出力データ	ファイル
hmlt	ハミルトニアン	関数ポインタ
d	ハミルトニアンの次元	int
k_p	高対称点のリスト	$3n_p$ 成分 double 配列
n_p	高対称点の数	int
n_k	運動量の分割数	int

2.3　半無限系におけるグリーン関数

```
void semi_inf(int dim, std::complex<double> z,
std::complex<double> *epsilon, std::complex<double> *t,
std::complex<double> *g)
```

半無限系のハミルトニアン

$$H = \sum_{-\infty \leq i \leq 0} \left(c_i^\dagger \epsilon c_i + c_i^\dagger t c_{i+1} + c_i t^\dagger c_{i-1} \right) \tag{5}$$

の終端 $i = 0$ におけるグリーン関数行列

$$G_\infty^{(\mathrm{L})}(z) = \langle i = 0 | (z - H)^{-1} | i = 0 \rangle \tag{6}$$

を求める．

表 4　semi_inf の入出力

引数	説明	型
g	出力 $G_\infty^{(\mathrm{L})}(z)$	$(\mathrm{dim})^2$ 成分 double complex 配列
dim	行列 ϵ, t の次元	int
z	複素振動数 z	double complex
epsilon	行列 ϵ	$(\mathrm{dim})^2$ 成分 double complex 配列
t	行列 t	$(\mathrm{dim})^2$ 成分 double complex 配列

表 5　sgfqz の入出力.

引数	説明	型
emat	ϵ	g^2 成分 double complex 配列
tmat	t	g^2 成分 double complex 配列
z	z	double complex
gmat	$G_{\infty}^{(\mathrm{L})}(z)$	g^2 成分 double complex 配列

2.4　一般化シュール分解による半無限系におけるグリーン関数

```
void sgfqz(std::vector<std::complex<double> > &emat,
vector<std::complex<double> > &tmat, std::complex<double> z,
std::vector<std::complex<double> > &gmat)
```

半無限系のハミルトニアン

$$H = \sum_{-\infty \le i \le 0} \left(c_i^{\dagger} \epsilon c_i + c_i^{\dagger} t c_{i+1} + c_i t^{\dagger} c_{i-1} \right) \tag{7}$$

の終端 $i = 0$ におけるグリーン関数行列

$$G_{\infty}^{(\mathrm{L})}(z) = \langle i = 0 | (z - H)^{-1} | i = 0 \rangle \tag{8}$$

を求める. 途中で t^{-1} を計算していない.

2.5　グリーン関数の漸化式

```
void gleft(int dim, std::complex<double> z,
std::complex<double> *epsilon, std::complex<double> *t,
std::complex<double> *g0, std::complex<double> *g1)
```

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

を計算する.

表 6　gleft の入出力

引数	説明	型
g1	出力 $G_l^{(\mathrm{L})}$	$(\mathrm{dim})^2$ double complex 配列
dim	行列 $t_{l-1}^\dagger$, $G_{l-1}^{(\mathrm{L})}$, t_{l-1} の次元	int
z	複素振動数 z	double complex
epsilon	行列 ϵ_l	$(\mathrm{dim})^2$ double complex 配列
t	行列 t_{l-1}	$(\mathrm{dim})^2$ double complex 配列
g0	行列 $G_{l-1}^{(\mathrm{L})}$	$(\mathrm{dim})^2$ double complex 配列