

半无限长金属导线自能的计算方法

2022 年 12 月 1 日

参考文献: J. Velez and W. Butler, On the equivalence of different techniques for evaluating the green function for a semi-infinite system using a localized basis, Journal of Physics: Condensed Matter 16, R637 (2004). DOI: 10.1088/0953-8984/16/21/R01

1. 引言

利用单粒子格林函数可以计算系统的可观测量并研究系统对于外界扰动的响应, 这种理论计算的方法称为格林函数法。对于系统物性的研究, 格林函数法主要具有如下的三个优点:

- (1) 它允许我们从简单的系统出发去处理较为复杂的系统。比如对于一个有限大, 含有缺陷的晶格, 我们可以开始计算完美的满足周期平移性的晶格对应的格林函数, 然后将界面和缺陷的影响作为扰动项来计算实际的格林函数。
- (2) 格林函数法不仅能够计算系统稳态的性质, 还能够计算系统对于外界响应 (线性响应理论)。
- (3) 格林函数法可以用作计算无序系统。

对于有限大小的系统, 可以使用实空间戴森公式来计算系统的推迟格林函数, $G(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dt [-i\theta(t-t')(\psi(\mathbf{r}, t)\psi^{\dagger}(\mathbf{r}', t') + \psi^{\dagger}(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}', t'))] \cdot \exp[i(\epsilon + i\eta)t/\hbar] = (\epsilon - H(\mathbf{r}))^{-1}$; 对于满足平移不变性和周期性边界条件的无限大的系统, 可以使用倒空间戴森公式来计算系统的推迟格林函数 $G(\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dt [-i\theta(t-t')(\psi(\mathbf{k}, t)\psi^{\dagger}(\mathbf{k}', t') + \psi^{\dagger}(\mathbf{k}, t)\psi(\mathbf{k}', t'))] \cdot \exp[i(\epsilon + i\eta)t/\hbar] = (\epsilon - H(\mathbf{k}))^{-1}$ 。而对于半无限大的系统, 因为它的哈密顿量对应的矩阵既为无限大, 又不满足平移不变性, 所以计算它的格林函数遇到了困难。下面将介绍三类计算半无限大系统格林函数的方法 (1) 基于表面格林函数递归关系的方法 (2) 基于振幅转移矩阵的加速迭代法 (3) 基于直接计算波函数系数和相邻层波函数相对相位的本征值方法。文章最后给出了分别用递归 (简单迭代) 和振幅转移矩阵计算半无限长金属导线自能的 matlab 代码。

2. 局域基和横向模态的分离

我们假设系统在界面内具有平移不变性, 但是在垂直于界面的方向上平移不变性被打破, 记这个方向为 z 方向。主层 (principal layer, 简记为 PL) 是 z 方向由一个或多个原子层组成的原胞, 只考虑最近邻主层的相互作用。平面波函数定义为界面上的原子在 k 空间的态函数。

$$|\bar{k}, z, \alpha, i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \sum_{\bar{R}} e^{i\bar{k} \cdot \bar{R}} |\bar{R}, z, \alpha, i\rangle \quad (1)$$

式中 \bar{R} 是晶格矢量在平面内的投影, z 是主层的标记, i 标记主层内部的原子层, α 表示自旋和轨道自由度。

系统的波函数可以展开为不同平面波函数的线性叠加

$$|\psi(\bar{k} k_z)\rangle = \sum_{z, \alpha i} C_{z, \alpha i} |\bar{k}, z, \alpha, i\rangle \quad (2)$$

式中

$$C_{z, \alpha i} = e^{i k_z z} C_{\alpha i} \quad (3)$$

使用平面波函数作为基函数, 薛定谔公式 $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ 变成了

$$\sum_m \bar{H}_{nm} C_m = 0 \quad (4)$$

式中 \bar{H} 定义为

$$\bar{H}_{nm|\alpha i \beta j} = \langle \bar{\mathbf{k}}, n, \alpha i | H - E | \bar{\mathbf{k}}, m, \beta j \rangle = H_{nm|\alpha i \beta j} - E S_{nm|\alpha i \beta j} \quad (5)$$

式中 H 是用平面波函数作为基函数表示的哈密顿量对应的矩阵, S 是基函数对应的重叠矩阵。在很多应用中平面波函数假设是正交的, $S_{nm|\alpha i \beta j} = \delta_{nm} \delta_{\alpha \beta} \delta_{ij}$ 。计算格林函数的公式 $(E - H)G = 1$ 可以写作

$$\sum_m \bar{H}_{n,m} G_{m,n'} = -\delta_{nn'} \quad (6)$$

式中 $G_{m,n'}$ 代表在平面波函数作为基函数下格林函数的矩阵元。

由于只考虑最近邻主层的相互作用, 公式 (4)(6) 中对 z 的求和只包含三项

$$\bar{H}_{n,n+1} C_{n+1} + \bar{H}_{n,n} C_n + \bar{H}_{n,n-1} C_{n-1} = 0 \quad (7)$$

$$\bar{H}_{n,n+1} G_{n+1,n'} + \bar{H}_{n,n} G_{n,n'} + \bar{H}_{n,n-1} G_{n-1,n'} = -\delta_{nn'} \quad (8)$$

利用块体内部的周期平移不变性可以做进一步的简化 $\bar{H}_{n,m} = \bar{H}_{m-n}$ 。选取 $n' = 0$ 作为参考层, 公式 (7) (8) 可以写成

$$\bar{H}_1 C_1 + \bar{H}_0 C_0 + \bar{H}_{-1} C_{-1} = 0 \quad (9)$$

$$\bar{H}_1 G_{n+1,0} + \bar{H}_0 G_{n,0} + \bar{H}_{-1} G_{n-1,0} = -\delta_{n0} \quad (10)$$

3. 表面和界面的自能

很多时候我们要计算半无限系统的格林函数, 例如要计算系统表面的性质 (图 1a) 或者计算输运行为 (图 1b)。

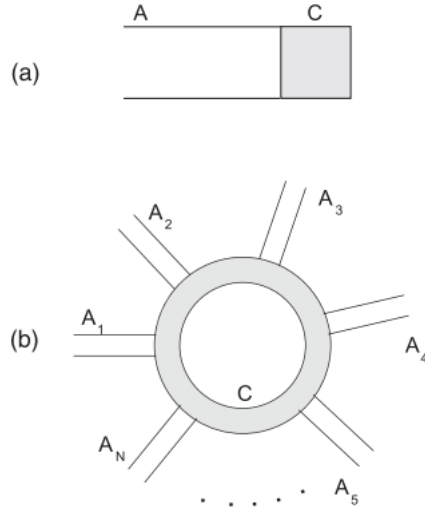


Figure 1. (a) Surface of a semi-infinite system showing the surface region (C) and semi-infinite lead (A) in which all principal layers are identical; (b) multiprobe geometry showing sample region (C) and semi-infinite leads (A_i).

3.1 连接两个系统

我们首先考虑两个未连接的系统 A,B, 如图 2(a) 所示, 它们的格林函数分别记为 G_{AA}^0 和 G_{BB}^0 。接下来通过引入界面处的相互作用能 V_{ab} 和 V_{ba} 将两个系统连接在一起。连接后系统的格林函数写为

$$G = (E - H_0 - V)^{-1} = ((G^0)^{-1} - V)^{-1} \quad (11)$$

式中

$$G = \begin{pmatrix} (G_{AA}^0)^{-1} & -V_{AB} \\ -V_{BA} & (G_{BB}^0)^{-1} \end{pmatrix}^{-1} \quad (12)$$

V_{AB} 和 V_{BA} 在界面以外的区域都为零。通过矩阵的逆运算我们可以得到

$$\begin{aligned} G_{AA} &= ((G_{AA}^0)^{-1} - V_{ab} G_{bb}^0 V_{ba})^{-1} \\ G_{BB} &= ((G_{BB}^0)^{-1} - V_{ba} G_{aa}^0 V_{ab})^{-1} \\ G_{BA} &= G_{Bb}^0 V_{ba} G_{aA} \\ G_{AB} &= G_{Aa}^0 V_{ab} G_{bB} \end{aligned} \quad (13)$$

式中小写字母表示相互作用限制在界面处。

这个看起来简单的结果**十分重要**。由于 A, B 之间的相互作用范围有限, 我们可以通过一个小矩阵来计入一个系统对另一个系统的影响, 这一项称作自能项 $\Sigma = G_0^{-1} - G^{-1}$ 。由于 A 的存在, B 的格林函数中要加入自能项 $\Sigma = V_{ba} G_{aa}^0 V_{ab}$, 由于 B 部分的存在, A 部分的格林函数中要加入自能项 $\Sigma = V_{ab} G_{bb}^0 V_{ba}$ 。因此, 对于图 1 中存在表面的系统, 我们可以将块体对表面区域格林函数的影响用一个只依赖于块体性质和块体与表面相互作用的自能项来表示。类似的, 我们可以将很多区域 $A_i, i = 1, 2, \dots, N$ 连接到区域 B。如果每个区域 A_i 互不交叠, 对 B 存在影响而产生的自能项是叠加的

$$G_B = ((G_B^0)^{-1} - \sum_{i=1}^N \Sigma_{A_i})^{-1} \quad (14)$$

式中 $\Sigma_{A_i} = V_{Bi} G_{ii}^0 V_{iB}$, 上标 0 代表是未连接时该部分的格林函数。因此, 对于图 1(b) 中所示的电子输运装置, 我们可以将所有半无线长引线 A_i 对探测器 C 的影响用自能项来表示, 这些自能可以被看作从 C 到 A_i 载流子的逃逸速度。

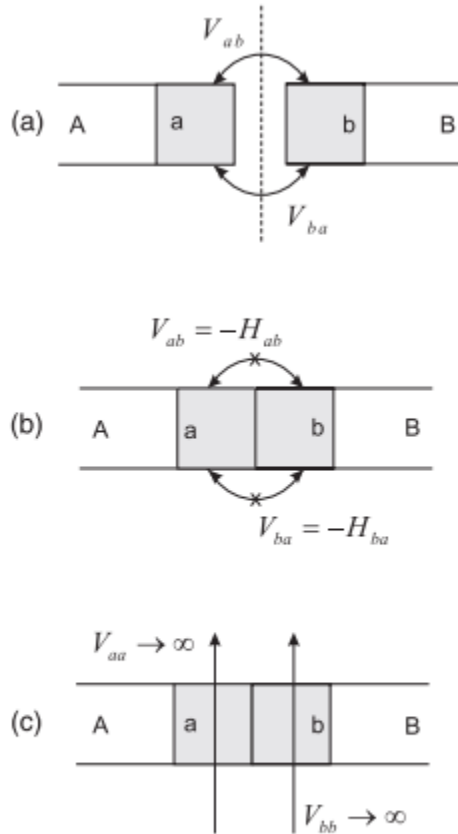


Figure 2. (a) Creating one material from two isolated pieces (A) and (B); (b) splitting the material into two isolated pieces (A) and (B) by bond cutting and (c) by atom removal.

3.2 含有表面的系统的格林函数

从另一个角度看, 公式 (13) 可以用作在给定各独立部分的格林函数和各部分之间相互作用的情况下, 得到各部分连接后的系统的所有格林函数矩阵元, G_{AA} 和 G_{BB} 分别代表 A 和 B 系统的格林函数矩阵元, G_{AB} 和 G_{BA} 代表接触界

面格点的格林函数矩阵元。我们可以用上一小节的结果推导表面格林函数，将公式 (11) 写作

$$\begin{aligned} G &= G^0 + G^0 T G^0 \\ T &= V(1 - G^0 V) \end{aligned} \quad (15)$$

上式的证明: $G = ((G^0)^{-1} - V)^{-1} = \frac{1}{((G^0)^{-1} - V)} = \frac{1}{(G^0)^{-1}} (1 + V \frac{1}{(G^0)^{-1} - V}) = G^0 (1 + V((G^0)^{-1} - V)^{-1}) = G^0 (1 + V((G^0)^{-1} (1 - G^0 V))^{-1}) = G^0 (1 + V(1 - G^0 V)^{-1} G^0)$

式中 G^0 是各部分的格林函数, V 是表面的相互作用能。我们这么做的原因是矩阵 T 的矩阵元只局域在表面区域, 也就是说 $T = V_{ss}(1 - G_{ss}^0 V_{ss})^{-1}$, 式中 $s = a \cup b$ 表示界面区域。

然后将公式 (15) 投影到界面区域, 求解出 T , 我们可以得到

$$T = \mathcal{G}^{0-1}(\mathcal{G} - \mathcal{G}^0)\mathcal{G}^{0-1} \quad (16)$$

式中 $\mathcal{G}^0 = G_{ss}^0$ 是独立部分格林函数的界面投影, $\mathcal{G} = G_{ss}$ 是连接外部后格林函数的界面投影。我们可以从公式 (15) 得到连接系统的格林函数

$$\begin{aligned} G_{AA} &= G_{AA}^0 + G_{Aa}^0 \mathcal{G}_{aa}^{0-1} (\mathcal{G}_{aa} - \mathcal{G}_{aa}^0) \mathcal{G}_{aa}^{0-1} G_{aA}^0 \\ G_{AB} &= G_{Aa}^0 \mathcal{G}_{aa}^{0-1} \mathcal{G}_{ab} \mathcal{G}_{bb}^{0-1} G_{bB}^0 \end{aligned} \quad (17)$$

因为独立系统的格林函数在界面上没有矩阵元。因此, 通过匹配格林函数的界面投影矩阵元, 我们成功得到了含有界面的系统的所有格林函数矩阵元。当投影于界面区域时, 格林函数的表面投影可以直接从公式 (12) 得到

$$\mathcal{G} = (\mathcal{G}_{aa}^0 + \mathcal{G}_{bb}^0 - \Delta\mathcal{H})^{-1} \quad (18)$$

式中 $\Delta\mathcal{H}$ 表示表面相互作用。最简单的情形下, 表面扰动只是通过界面耦合 V 。原则上来说, 它可以包括更多复杂的物理, 例如肖特基势垒, 缺陷或其他表面效应。

3.3 键切割和去除原子

在 3.1 节中我们展示了块体格林函数可以通过连接两个表面格林函数得到。类似的技巧也可以用来解决相反的问题, 即从块体的格林函数得到各部分的格林函数。半无线介质的格林函数可以通过切割键或者去除原子来将块体的格林函数分裂成两个独立的部分来获得。为了使用这个方法, 我们需要在界面处移除够多的原子或者切除足够多的化学键使得两边的部分不再有相互作用。轨道切割技术如图 2(b) 所示。通过引入一个额外的大小相等, 方向相反的相互作用来关闭原子间的相互作用。如果 G^0 是块体格林函数, $V_{ab} = -H_1$, $V_{ba} = -H_1$, 其中 $H_1 = H_1^\dagger$ 是主层之间的相互作用能, 我们可以将公式 (11) 写成

$$G = - \left[\begin{pmatrix} \ddots & & & \\ & \bar{H}_0 & \bar{H}_1 & \\ & \bar{H}_1 & \bar{H}_0 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \ddots & & & \\ & 0 & -\bar{H}_1 & \\ & -\bar{H}_1 & 0 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \right]^{-1} = \begin{pmatrix} G_{AA} & 0 \\ 0 & G_{BB} \end{pmatrix} \quad (19)$$

式中 G_{AA} 和 G_{BB} 根据定义是表面格林函数。对于一个实际的计算, 最方便的方法是始于公式 (15)

$$G_{SS} = G_{SS}^0 + G_{Ss}^0 t_{ss} G_{sS}^0 \quad (20)$$

式中 $S = A \cup B$ 。界面层间的格林函数矩阵元必须为零, 用来保证所有的键被正确切割。

去除原子技巧, 如图 2(c) 所示, 是通过设置界面处原子的能级到无穷大产生相同的结果。如果 G^0 是块体格林函数, $V_{ab} = V_{ba} = 0, V_{aa} = V_{bb} = u \rightarrow \infty$, 公式 (11) 变成

$$G = - \left[\begin{pmatrix} \ddots & & & \\ & \bar{H}_0 & \bar{H}_1 & \\ & \bar{H}_1 & \bar{H}_0 & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \ddots & & & \\ & u & 0 & \\ & 0 & u & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} \right]^{-1} = \begin{pmatrix} G_{AA} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & G_{BB} \end{pmatrix} \quad (21)$$

最后结果里面的矩阵 G_{AA} 和 G_{BB} 是表面格林函数，和 (19) 式对比，我们可以地看出键切割和去除原子技巧的等价性。对于实际的计算，我们从公式 (15) 出发，系统表面区域 s 和剩余区域 $\bar{s} = (A \cup B)/s$ 之间的格林函数矩阵元是

$$\begin{aligned} G_{ss} &= G_{ss}^0 + G_{ss}^0 T_{ss} G_{ss}^0 \\ G_{\bar{s}s} &= G_{\bar{s}s}^0 + G_{\bar{s}s}^0 T_{ss} G_{ss}^0 \\ G_{s\bar{s}} &= G_{s\bar{s}}^0 + G_{ss}^0 T_{ss} G_{s\bar{s}}^0 \\ G_{\bar{s}\bar{s}} &= G_{\bar{s}\bar{s}}^0 + G_{\bar{s}s}^0 T_{ss} G_{s\bar{s}}^0 \end{aligned} \quad (22)$$

当 $u \rightarrow \infty$ 时， $T \rightarrow -(G_{ss}^0)^{-1}$ 。因此，表面区域和系统其余部分之间的格林函数矩阵元素等于 0。

$$\begin{aligned} G_{ss} &= G_{\bar{s}s} = G_{s\bar{s}} = 0 \\ G_{\bar{s}\bar{s}} &= G_{\bar{s}\bar{s}}^0 - G_{\bar{s}s}^0 (G_{ss}^0)^{-1} G_{s\bar{s}}^0 \end{aligned} \quad (23)$$

一般来说，原子去除技巧用到的表面矩阵比键切割方法小一半，更不容易出错。

如果我们已经有块体格林函数的话这个技巧非常的实用。我们在第 6 节中也将会介绍，如果我们求解哈密顿量的本征函数和本征值，可以直接得出表面格林函数而不需要先计算块体格林函数。

4. 自能的递归关系

这一节关注于计算半无限介质的格林函数。递归（或者称为连续分数）法将给定层的格林函数 G_{nn} 和相邻层的格林函数 $G_{n+1,n+1}$ ， $G_{n-1,n-1}$ 联系起来。如果我们从表面层 $n=0$ 开始，并执行递归过程到无限深，将考虑所有层对表面层的影响。但是在实际的计算中我们必须在一定的深度截断递归过程，相当于只考虑有限相邻层对表面层的影响。同样的，递归也可以很方便的写成迭代的形式，在迭代方法中，某一层格林函数的迭代值 $G^{(n)}$ 可以从上次迭代得到的值 $G^{(n-1)}$ 得出。有限次数的迭代等价于递归到有限深度。因此，这两个方法都等价于在距离表面有限层处截断半无限长介质。递归或迭代的方法和简单的截断相比有非常大的优点，因为连续递归和迭代可以用来估计截断的误差，我们将在第 7 节讨论这一点。

简单截断，递归和简单迭代方法这三种方法的计算步骤不同，但是有相同的物理思想，它们的复杂度随着计算的深度线性增加。由于它们有相同的收敛性，我们把这些技术统称为递归方法。

根据上一节的规定，我们将半无限长介质分成两部分，第一部分是表面处的主层，第二部分是系统剩余的半无限长的部分。在上一节的标记法中， C 是表面的孤立主层，下文记为符号 0 ， A 是编号从 1 到 ∞ 的主层。利用公式 (14)，考虑到 A 区域的自能项，我们可以得到格林函数 G_{00} 的表达式。

$$G_{00}^R = ((G_{00}^0)^{-1} - H_{01} G_{11} H_{10})^{-1} = ((G_{00}^0)^{-1} - \Sigma_{00}^R)^{-1} \quad (24)$$

式中 $G_{ii}^0 = (ES_{ii} - H_{ii})^{-1}$ 是孤立主层的格林函数。

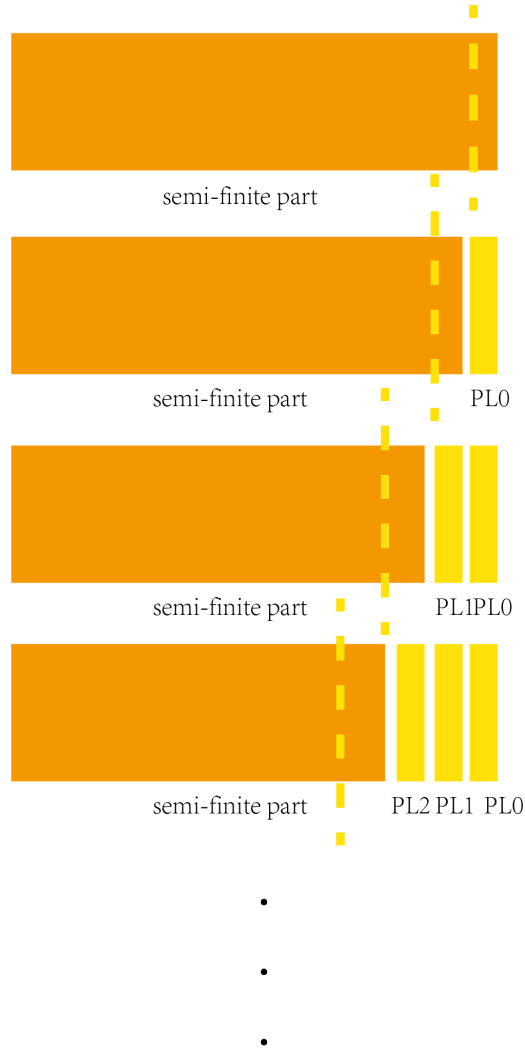


图 2.1

我们可以继续将半无限长的部分分离成表面主层和剩余部分，如图 2.1 所示。下一步等价于应用 Σ^R 的递归公式

$$\Sigma_{00}^R = H_{01}((G_{11}^0)^{-1} - \Sigma_{11}^R)^{-1} H_{10} \quad (25)$$

一般来说，对于左表面 ($i > 0$)，由于第 $i+1$ 个主层影响而产生的第 i 个主层的自能可表示为

$$\Sigma_{i,i}^R = H_{i,i+1} G_{i+1,i+1} H_{i+1,i} = H_{i,i+1} ((G_{i+1,i+1}^0)^{-1} - \Sigma_{i+1,i+1}^R)^{-1} H_{i+1,i} \quad (26)$$

对于右表面 ($i < 0$)，

$$\Sigma_{i,i}^L = H_{i,i-1} G_{i-1,i-1} H_{i-1,i} = H_{i,i-1} ((G_{i-1,i-1}^0)^{-1} - \Sigma_{i-1,i-1}^L)^{-1} H_{i-1,i} \quad (27)$$

同样的方法可以被用来计算无限长固体的格林函数。这种情况下我们将块体分成左中右三部分，然后使用公式 (14)，中间区域的格林函数可以写成

$$G_{00} = ((G_{00}^0)^{-1} - H_{01} G_{11} H_{10} - H_{0\bar{1}} G_{\bar{1}\bar{1}} H_{\bar{1}0})^{-1} = ((G_{00}^0)^{-1} - \Sigma_{00}^R - \Sigma_{00}^L)^{-1} \quad (28)$$

式中 Σ_{00}^R 和 Σ_{00}^L 分别由公式 (26) (27) 给出。

考虑一维系统的输运，表面格林函数可以表达为连分式

$$G_{00}^R = \frac{1}{E - H_{00} - \frac{H_{01} H_{10}}{E - H_{11} - \frac{H_{12} H_{21}}{E - H_{22} - \dots}}} \quad (29)$$

在这个表达式中只有两种类型的项： $a_i = (E - H_{i,i})^{-1}$ 和 $b_i = H_{i,i+1}a_{i+1}H_{i+1,i}$ 。

注意一直到这一步，我们并没有假设系统是同质的，也就是由重复的相同层构成。在这方面，递归比简单迭代，加速迭代（第 5 节）或本征值（第 6 节）方法更一般化，它是唯一对于无限，非周期性固体适用的方法。

如果系统是由相同的层构成，那么有 $H_{n,n+1} = H_1$ ， $H_{n,n-1} = \bar{H}_1$ ， $G_{nn}^0 = G_{00}$ ，递归公式（26）（27）变成

$$\Sigma = H_1((G_{00}^0)^{-1} - \Sigma)^{-1}H_1 \quad (30)$$

由于所有的量都用矩阵表示，这是一个非线性方程组，可以用 Newton-Raphson 计算方法精确求解。如果 H_0 和 H_1 是标量，这个解是容易的。例如，对于一个有格点势 ε_0 和最近邻跃迁矩阵元 w 的一维半无限长链，自能的递归公式为

$$\Sigma = w^2[\varepsilon - \varepsilon_0 - \Sigma]^{-1} \quad (31)$$

定义 $\sigma = \Sigma/w$ ， $x = (\varepsilon - \varepsilon_0)/w$ ，公式（31）可以写成 $\sigma = (x - \sigma)^{-1}$ ，它的解为 $\sigma = \frac{x}{2} \pm \sqrt{\frac{x^2}{4} - 1}$ 。正负号的确定根据 $\text{Im}\Sigma < 0$ 。

一个求解非线性公式（30）的迭代的方式为将公式（30）写成

$$\Sigma^{(n+1)} = H_1((G_{00}^0)^{-1} - \Sigma^{(n)})^{-1}H_1 \quad (32)$$

式中 $\Sigma^{(0)} = 0$ 。这本质上是一种简单的迭代技术。另一种将递归方法重新表述为迭代方法的方法是使用振幅转移矩阵。振幅转移矩阵定义为

$$\begin{aligned} G_{n+1,m} &= TG_{n,m} \\ G_{n-1,m} &= \bar{T}G_{n,m} \end{aligned} \quad (33)$$

这个方法很自然地引出了我们下一节中将要研究的加速迭代技术。

当 $n = 0$ 时，块体格林函数部分的表达式可以从公式（10）得到

$$\bar{H}_1 G_{10} + \bar{H}_0 G_{00} + \bar{H}_{\bar{1}} G_{\bar{1}0} = -1 \quad (34)$$

使用 T 和 \bar{T} 的定义我们可以得到

$$G_{00} = -(\bar{H}_0 + \bar{H}_1 T + \bar{H}_{\bar{1}} \bar{T})^{-1} \quad (35)$$

设置左右表面相应的哈密顿量为 0，我们可以得到右边和左边表面格林函数的表达式

$$\begin{aligned} G_{00}^R &= -(\bar{H}_0 + \bar{H}_1 T)^{-1} \\ G_{00}^L &= -(\bar{H}_0 + \bar{H}_{\bar{1}} \bar{T})^{-1} \end{aligned} \quad (36)$$

通过和公式（24），（28）比较，我们可以看出振幅转移矩阵正比于自能或表面格林函数。

$$\begin{aligned} \Sigma^R &= H_1 T, & T &= G_{00}^R H_1 \\ \Sigma^L &= H_{\bar{1}} \bar{T}, & \bar{T} &= G_{00}^L H_{\bar{1}} \end{aligned} \quad (37)$$

从公式（8）我们可以得出当 $n' = 0$ ， $n \neq 0$ 时有

$$G_{n,0} = -\bar{H}_0^{-1}(\bar{H}_{-1}G_{n-1,0} + \bar{H}_1 G_{n+1,0}) \quad (38)$$

对于 $n > 0$ ，使用 T 的定义式（33），我们可以得到

$$T = -(1 + \bar{H}_0^{-1} \bar{H}_1 T)^{-1} \bar{H}_0^{-1} \bar{H}_{-1} \quad (39)$$

等价的，对于 $n < 0$ ，使用 \bar{T} 的定义我们可以得到

$$\bar{T} = -(1 + \bar{H}_0^{-1} \bar{H}_{-1} \bar{T})^{-1} \bar{H}_0^{-1} \bar{H}_1 \quad (40)$$

标记 $u_0 = -\bar{H}_0^{-1}\bar{H}_{-1}, v_0 = -\bar{H}_0^{-1}\bar{H}_1$ ，上面的表达式可以写成

$$\begin{aligned} T &= (1 - v_0 T)^{-1} u_0 \\ \bar{T} &= (1 - u_0 \bar{T})^{-1} v_0 \end{aligned} \quad (41)$$

注意到如果 $\bar{H}_{-1} = \bar{H}_1$ 的话， T 和 \bar{T} 的公式变得完全一样。

方程组 (41) 可以通过迭代的方法求解

$$\begin{aligned} T^{(n+1)} &= (1 - v_0 T^{(n)})^{-1} u_0 \\ \bar{T}^{(n+1)} &= (1 - u_0 \bar{T}^{(n)})^{-1} v_0 \end{aligned} \quad (42)$$

式中 $T^{(0)} = 0, \bar{T}^{(0)} = 0$ 。

5. 加速迭代

在本节中，我们展示了加速上一节中开发的迭代方案的可能性。其理念是在每个步骤中关联两层非相邻的主层，而不是关联相邻的主层。这个技术可以通过格林函数法和振幅转移矩阵法实现。我们将在第 7 节中说明加速迭代方案的收敛性与递归方法有很大的不同。

对于 $G_{n-1,0}$ 和 $G_{n+1,0}$ ，我们递归地应用 (38) 式。我们能够得到联系 $G_{n,0}$ 和 $G_{n\pm 2,0}$ 的公式

$$G_{n,0} = u_1 G_{n-2,0} + v_1 G_{n+2,0} \quad (43)$$

式中 $u_1 = (1 - u_0 v_0 - v_0 u_0)^{-1} u_0^2$ ， $v_1 = (1 - u_0 v_0 - v_0 u_0)^{-1} v_0^2$ 。第 i 次迭代后我们可以得到一般的公式

$$G_{n,0} = u_i G_{n-2^i,0} + v_i G_{n+2^i,0} \quad (44)$$

式中

$$\begin{aligned} u_i &= (1 - u_{i-1} v_{i-1} - v_{i-1} u_{i-1})^{-1} u_{i-1}^2 \\ v_i &= (1 - u_{i-1} v_{i-1} - v_{i-1} u_{i-1})^{-1} v_{i-1}^2 \end{aligned} \quad (45)$$

我们可以清楚地看到在迭代 i 次后我们已经考虑了 2^i 个临近层的相互作用。取 $n = 2^i$ ，我们可以写出 (44) 式的前几个公式

$$\begin{aligned} G_{1,0} &= u_0 G_{0,0} + v_0 G_{2,0}, & i=0 \\ G_{2,0} &= u_1 G_{0,0} + v_1 G_{4,0}, & i=1 \\ &\dots & \dots \\ G_{2^i,0} &= u_i G_{0,0} + v_i G_{2^{i+1},0}, & i \end{aligned} \quad (46)$$

将它们以从下到上的顺序带入，考虑到可以迭代到 v_i 充分小，我们可以得到公式 $G_{1,0} = T G_{0,0}$ ，式中

$$T = u_0 + v_0 u_1 + v_0 v_1 u_2 + \dots + v_0 \dots v_{i-1} u_i + \dots \quad (47)$$

对于 $n < 0$ ，我们可以得到 $G_{-1,0} = \bar{T} G_{0,0}$ ，式中

$$\bar{T} = v_0 + u_0 v_1 + u_0 u_1 v_2 + \dots + u_0 \dots u_{i-1} v_i + \dots \quad (48)$$

通过将 u 和 v 的定义代入传递矩阵的表达式，我们可以显式地证明 T 和自能的等价性。对振幅转移矩阵地连续近似使考虑到的层数翻了一倍。

值得注意的是，这种加速迭代技术和上一节讨论的迭代技术都有效地计算了半无限系统的自能。对于简单迭代过程， N 次迭代后产生的自能对应于 N 层系统，而对于加速技术则对应于 2^N 层系统。例如，通过检查一维链的自能的解析结构，很容易看出，使用迭代过程的任何近似级别的解析结构都不同于真正无限系统的解析结构。格林函数和自能的收敛性将在第 7 节中详细讨论。在下一节中，我们将开发一种不依赖于迭代过程的计算自能的方法。

6. 本征值方法

哈密顿量的传播和耗散态统称为系统的复能带结构。为了出格林函数，我们必须了解复能带结构。然而，这种方法要计算久期公式特征多项式的复根，这个计算量非常大。幸运的是，复能带结构可以通过对角化哈密顿量的伴生矩阵得到。

对于一个无限周期性系统，相邻层的波函数通过公式 (3) 中所示的相位因子联系在一起。从式 (9) 中确定相位因子是困难的，因为它涉及到求复多项式的根。但是，有可能将公式 (9) 写作本征值公式的形式，这样的话，相位因子就是哈密顿量伴随矩阵的本征值。

$$\begin{pmatrix} -(\bar{H}_1)^{-1}\bar{H}_0 & -(\bar{H}_1)^{-1}\bar{H}_1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \end{pmatrix} = e^{ik_z\Delta z} \begin{pmatrix} C_0 \\ C_1 \end{pmatrix} \quad (49)$$

式中第二行就是定义式 $C_0 = e^{ik_z\Delta z}C_1$ 。复能带结构由满足公式 (49) 的复波矢 k_z 构成。本征态可以分为向右传播（衰减）波 $k_z^>$ 和向左传播（衰减）波 $k_z^<$ ，对应的本征矢分别记为 $C^>$ 和 $C^<$ 。

类似的，我们可以将公式 (10) 写成

$$\begin{pmatrix} -(\bar{H}_1)^{-1}\bar{H}_0 & -(\bar{H}_1)^{-1}\bar{H}_1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_{n,0} \\ G_{n-1,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{n+1,0} \\ G_{n,0} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (\bar{H}_1)^{-1}\delta_{n,0} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (50)$$

式中第二行为简单的重复 $G_{n,0} = G_{n,0}$ 。公式 (50) 定义了传输矩阵 T ，因为它将第 n 个主层的格林函数和第 $n+1$ 个主层的格林函数联系起来。传递矩阵的逆 T^{-1} 则相反，即它将第 n 个主层的格林函数和第 $n-1$ 个主层的格林函数联系起来。顺便说一下，传递矩阵只是哈密顿量的伴随矩阵，式 (49) 可以重新解释为传递矩阵的特征值公式。

我们可以通过公式 (50) 得到格林函数的表达式。如果当 $n > 0$ 时，格林函数满足公式 (50)，并且在无穷远处可归一化。

$$T \begin{pmatrix} G_{n,0} \\ G_{n-1,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} G_{n+1,0} \\ G_{n,0} \end{pmatrix} \quad (51)$$

那么格林函数必须为这样的形式

$$\begin{pmatrix} G_{n+1,0} \\ G_{n,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{n+1}^> g_1 \\ C_n^> g_1 \end{pmatrix} \quad (52)$$

式中 g_1 是待确定的常数。如果格林函数满足公式 (50) 对于 $n < 0$ ，并且在负无穷远处可归一化。

$$\begin{pmatrix} G_{n,0} \\ G_{n-1,0} \end{pmatrix} = T^{-1} \begin{pmatrix} G_{n+1,0} \\ G_{n,0} \end{pmatrix} \quad (53)$$

那么格林函数必须扩展到左的状态

$$\begin{pmatrix} G_{n,0} \\ G_{n-1,0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_n^< g_2 \\ C_{n-1}^< g_2 \end{pmatrix} \quad (54)$$

式中 g_2 是另一个待确定的系数。注意，两个表达式中使用了相同的波函数系数 C ，因为 T 和 T^{-1} 必须具有相同的特征向量集，因为每个矩阵都与它的逆矩阵对易。对于 $n = 0$ ，我们有

$$\begin{pmatrix} -(\bar{H}_1)^{-1}\bar{H}_0 & -(\bar{H}_1)^{-1}\bar{H}_1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_0^< g_2 \\ C_1^< g_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_1^> g_1 \\ C_0^> g_1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (\bar{H}_1)^{-1} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (55)$$

这个公式的第二行是 $g_1 = (C_0^>)^{-1}C_0^< g_2$ ，第一行是

$$\bar{H}_0 C_0^< g_2 + \bar{H}_1 C_1^< g_2 + H_1 C_1^> g_1 = 1 \quad (56)$$

可以分别求解 g_2 和格林函数。

$$G_{00} = -C_0^< g_2 = -(\bar{H}_0 + H_1 C_1^< (C_0^<)^{-1} + H_1 C_1^> (C_0^>)^{-1})^{-1} \quad (57)$$

另外，通过和公式（35）对比，我们可以得出振幅转移矩阵的表达式为

$$\begin{aligned} T &= C_1^> (C_0^>)^{-1} \\ \bar{T} &= C_1^< (C_0^<)^{-1} \end{aligned} \quad (58)$$

在这种记号中，振幅转移矩阵有非常明确的物理意义。它们除以参考层的振幅，并在右/左一层创建了相应的振幅。如果记 Λ^\pm 为 T 的本征值组成的对角矩阵。

$$\begin{aligned} T &= C_0^> \Lambda^> (C_0^>)^{-1} \\ \bar{T} &= C_0^< (\Lambda^<)^{-1} (C_0^<)^{-1} \end{aligned} \quad (59)$$

再次使用公式（3），将振幅转移矩阵带入波函数产生

$$\begin{aligned} TC_0^> &= C_0^> \Lambda^> = C_1^> \\ \bar{T}C_0^< &= C_0^< (\Lambda^<)^{-1} = C_1^< \end{aligned} \quad (60)$$

换句话说，振幅转移矩阵的作用就是将状态（ C 组成的列矩阵）乘以相位。

类似的，我们可以发现格林函数的公式

$$\begin{aligned} TG_{n,0} &= TC_n^> g_1 = C_{n+1}^> g_1 = G_{n+1,0} \quad n \geq 0 \\ \bar{T}G_{n,0} &= \bar{T}C_n^< g_1 = C_{n-1}^< g_2 = G_{n-1,0} \quad n \leq 0 \end{aligned} \quad (61)$$

如预期的那样关联了相邻层的格林函数。因此，特征值方法产生的振幅转移矩阵可用于构造表面自能和格林函数，如第4节所示。

7. 收敛性

在简单的截断方法中，格林函数是使用靠近表面的有限数量的层来计算的。在递归（简单迭代）和加速迭代方法中，执行有限数量的递归和迭代步骤也相当于在距离接触面一定数量的原子层截断半无限介质。但是，与简单的截断不同，截断的误差是可以估计的。振幅转移矩阵近似为级数 $T = \sum_i a_i$ ，记 $T^n = \sum_{i=1}^n a_i$ 为这个级数的前 n 个部分和。柯西收敛准则指出 $\forall \epsilon > 0, p > 0, \exists n > 0 : |T^{n+p} - T^n| < \epsilon$ 。特别的（ $p = 1$ ），这意味着 $\forall \epsilon > 0, p > 0, \exists n > 0 : |a_n| < \epsilon$ 。因此，级数 $a_n \rightarrow 0$ 是收敛的必要条件，而不是充分条件。然而，检验柯西准则将需要计算 T 到任意级数的能力，因此，在实际计算中采用较弱的判据。

作为一个例子，我们考虑只有一个能带的一维半无限原子链。物理模型的参数选取为 $H_0 = t$ ， $H_1 = H_{\bar{1}} = w$ 。图4（a）（b）显示了该链表面格林函数的实部和虚部。将收敛后的结果与使用简单迭代法在少量迭代（ $n = 30$ ）下得到的结果进行比较。在图4（c）（d）中比较了收敛的格林函数和在大量迭代（ $n=300$ ）后得到的格林函数。能量的虚部为 $\delta = 0.01$ ，收敛的准则为 $\epsilon = 10^{-6}$ 。图中纵坐标和横坐标都以无量纲量 $g = wG$ 和 $x = (E - t)/w$ 为基本单位表示，其中 G 和 E 分别为格林函数和能量。

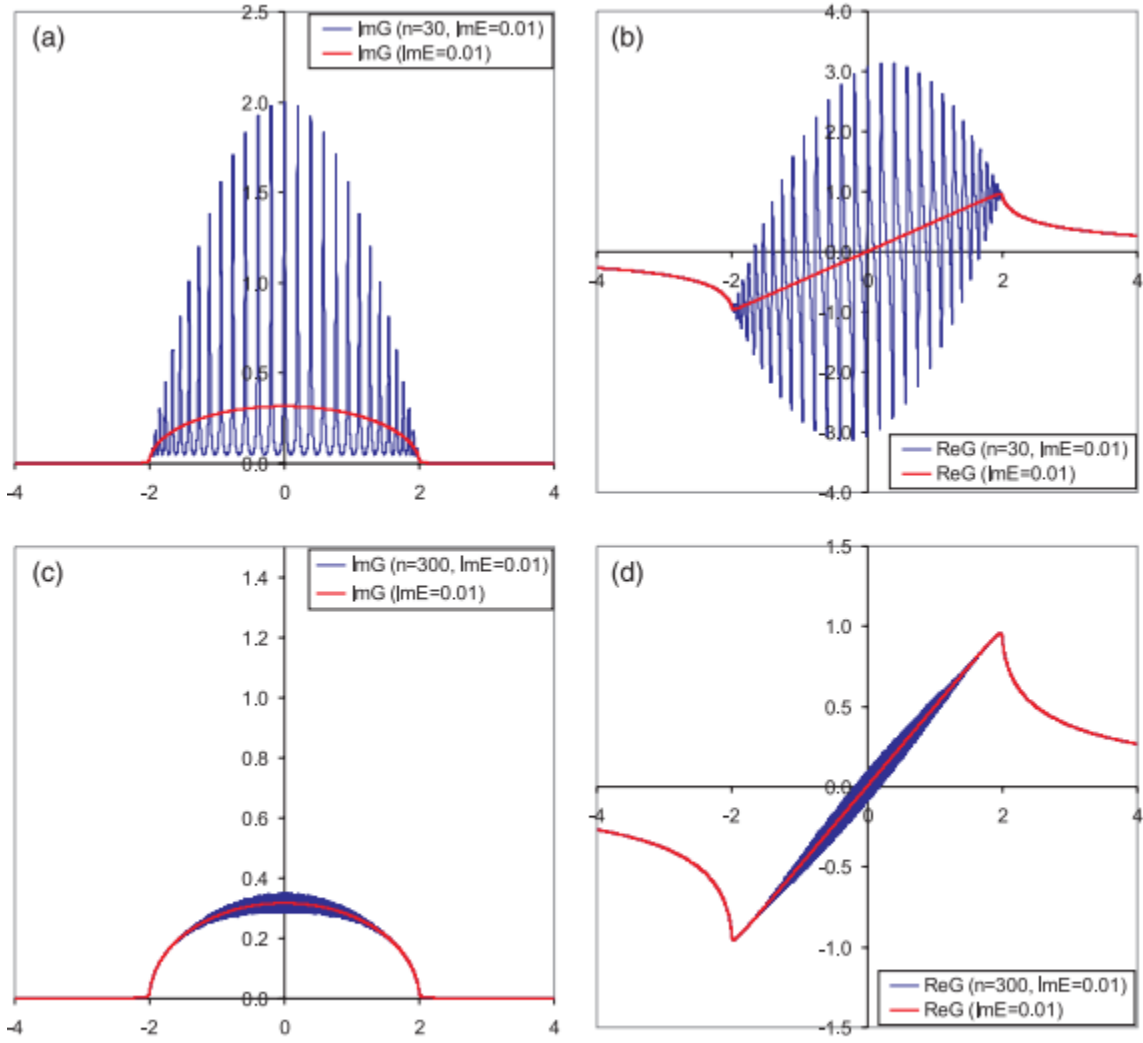


Figure 4. Surface Green function versus energy for a 1D semi-infinite chain: (a) $-\text{Im } G (n = 30)$, (b) $\text{Re } G (n = 30)$, (c) $-\text{Im } G (n = 300)$, (d) $\text{Re } G (n = 300)$ after n iterations of the recursive approximation; an imaginary part $\delta = 10^{-2}$ is added to the energy. The result is compared to the result converged to precision $\epsilon = 10^{-6}$.

图 5 (a, b) 显示了块体格林函数的虚部和实部。将收敛结果与使用这种加速迭代方法进行少量迭代 ($n = 5$) 得到的结果进行比较。在图 5(c) 和 (d) 中, 相同的函数在迭代方法进行几次迭代后绘制出来。与一般迭代迭代方法 (图 4) 相比, 需要更少的迭代才能获得收敛性。

特征值法的结果与图 4 和图 5 的收敛结果没有区别。振幅转移矩阵的特征值表达式表示为一个未截断的连分式。

取能量的虚部 $\delta \rightarrow 0$ 来逼近解析结果。使用大 δ 可以使结果收敛得更快, 但可能导致不准确的结果。这对奇点周围的区域尤其如此, 如图 6(a) 和 (b) 所示。用迭代法计算的体格林函数的虚部和实部也观察到了同样的行为, 如图 6(c) 和 (d) 所示。在这些图中, 能量的两个不同虚部进行了比较。在相同的迭代次数下, $\delta = 10^{-1}$ 得到的结果的偏差远远小于 $\delta = 10^{-2}$ 得到的结果 (图 4 和图 5), 因此更接近收敛。然而, 结果与准确的结果相差甚远。因此, 更高的精度要求较低的能量虚部, 然而, 使收敛速度慢得多。

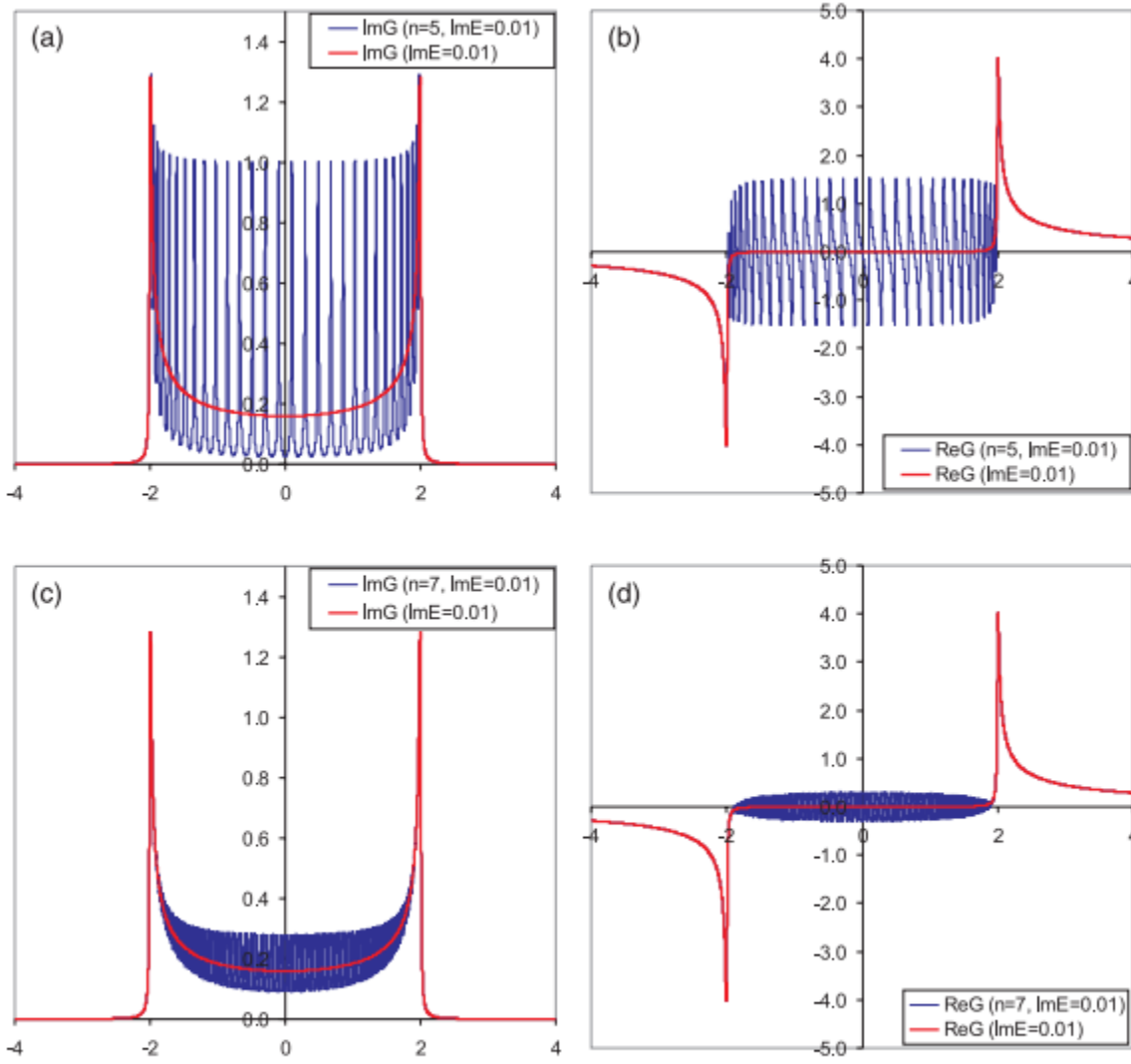


Figure 5. Bulk Green function versus energy of an infinite 1D chain: (a) $-\text{Im } G$ ($n = 5$), (b) $\text{Re } G$ ($n = 5$), (c) $-\text{Im } G$ ($n = 7$), (d) $\text{Re } G$ ($n = 7$) after n iterations of the iterative method; an imaginary part $\delta = 10^{-2}$ is added to the energy. The result is compared to the result converged to precision $\epsilon = 10^{-6}$.

能量的虚部决定了两极周围峰顶的宽度和高度。粗略地说，当极点重叠以覆盖分隔两极的能量区间 $\delta \sim W/N_{pole}$ 时，就达到了收敛，其中 N_{pole} 是极点的数量， W 是带宽的度量。更精确地说， δ 应该大于 $1/D^0(E_0)$ ，其中 $D^0(E_0)$ 是状态密度的最小值。如果我们保持精度不变指数递减 δ ，我们需要指数增长的极点数量来维持给定的收敛水平。递归和迭代方法在一个能量点 $x = 0$ 处的收敛性如表 1 所示。从中可以看到，精确度的指数级增长导致递归方法的指数级减速。特征值方法保持恒定的复杂性和不断增加的精度，因为用于求解复能带结构的直接方法只依赖于哈密顿矩阵的秩。

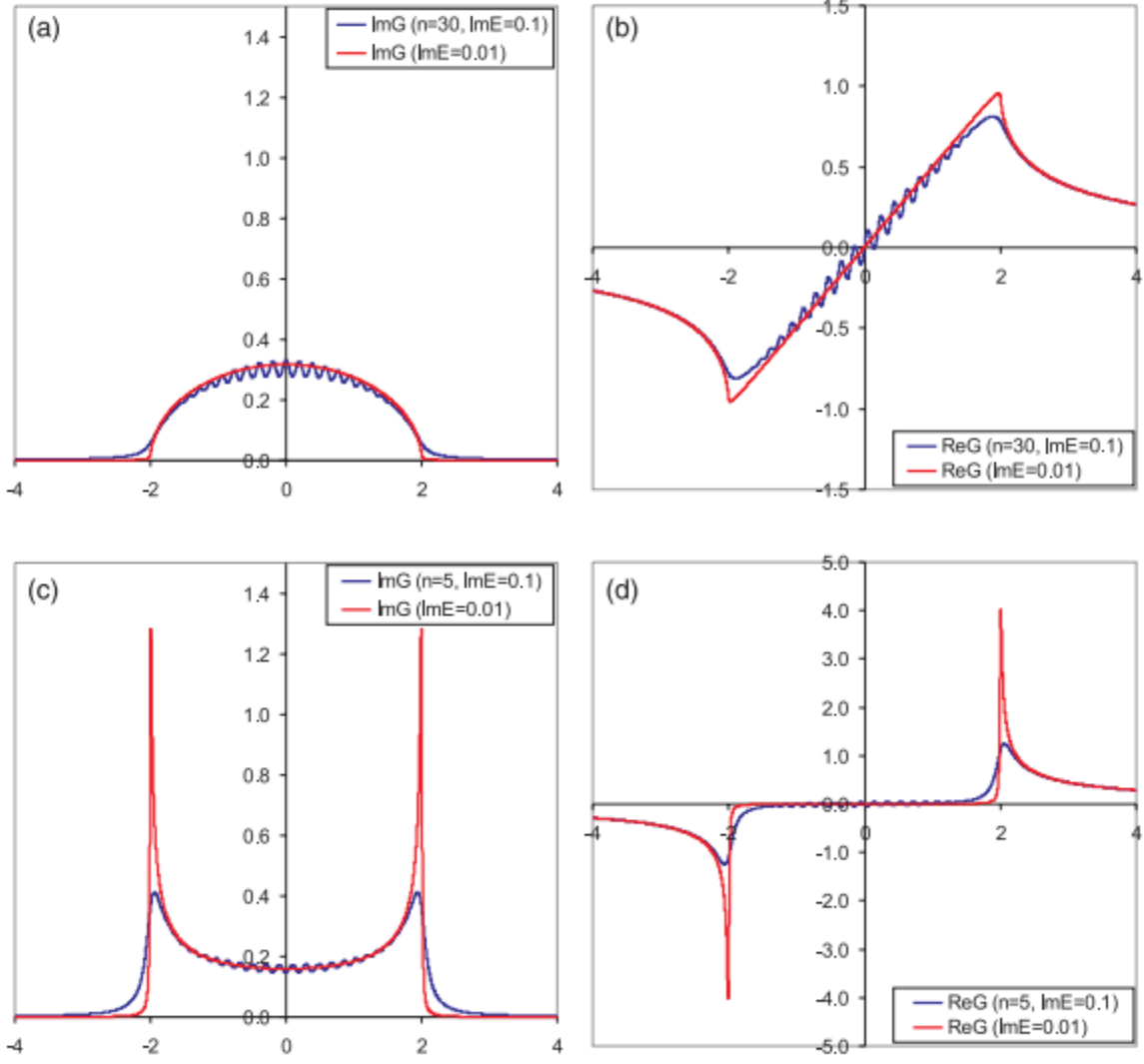


Figure 6. Green functions versus energy for a 1D chain: (a) $-\text{Im } G$ for surface ($n = 30$), (b) $\text{Re } G$ for surface ($n = 30$) after n iterations of the recursive method, (c) $-\text{Im } G$ ($n = 5$), (d) $\text{Re } G$ ($n = 5$) after n iterations of the iterative method; an imaginary part $\delta = 10^{-6}$ is added to the energy. The results are compared to the result converged to precision $\epsilon = 10^{-6}$ and $\delta = 10^{-2}$.

8. 非对角矩阵元

从格林函数的格点矩阵元素可以得到所有必要的格林函数矩阵元素。在块体中，由于平移不变性 ($G_{nn} = G_{00}$)，我们不需要超过 G_{00} 和 T 和 T^{-} 来获得所有使用振幅转移矩阵 (33) 定义的格林函数矩阵元素。对于表面的情况，在物质深处的 G_{nn} 与靠近表面的不一样。我们可以设计递归关系，使我们能够得到所有对角矩阵元素，并从中得到所有非对角矩阵元素。由式 (8) 开始，对于 $n = n' > 0$ 有

$$\bar{H}_0 G_{n,n} = -1 - \bar{H}_1 G_{n+1,n} - \bar{H}_{-1} G_{n-1,n} \quad (62)$$

我们可以使用 T 的定义

$$(\bar{H}_0 + \bar{H}_1 T) G_{n,n} = -1 - \bar{H}_{-1} G_{n-1,n} \quad (63)$$

从中，利用表面格林函数公式 (24) 的定义和振幅转移矩阵与表面格林函数 (37) 的关系，我们得到

$$G_{n,n} = \begin{cases} G_{00} + T G_{n-1,n-1} S & n \geq 1 \\ G_{00} + \bar{T} G_{n+1,n+1} S & n \leq -1 \end{cases} \quad (64)$$

第二个关系式是用类似的方法得到的。矩阵 S 和 S^- 是 T 和 T^- 的类似物，用于提高或降低格林函数的第二个索引。它们的定义如下：

$$\begin{aligned} G_{n,m+1} &= G_{n,m} S & n \leq m \\ G_{n,m-1} &= G_{n,m} \bar{S} & n \geq m \end{aligned} \quad (65)$$

块体格林函数和表面格林函数的表达式可以用 S 和 S^- 来推导，使用的参数类似于公式 (35) 和 (36) 的推导。块体格林函数变成了

$$G_{00} = -(\bar{H}_0 + S\bar{H}_1 + \bar{S}\bar{H}_1)^{-1} \quad (66)$$

左右两边的表面格林函数为

$$\begin{aligned} G_{00}^R &= -(\bar{H}_0 + S\bar{H}_1)^{-1} \\ G_{00}^L &= -(\bar{H}_0 + \bar{S}\bar{H}_1)^{-1} \end{aligned} \quad (67)$$

将式 (35) 与式 (66) 比较，可以发现两种振幅转移矩阵之间的简单关系

$$S = \bar{H}_1 T (\bar{H}_1)^{-1} \quad \bar{S} = \bar{H}_1 T (\bar{H}_1)^{-1} \quad (68)$$

最后，我们可以使用 $T(T^-)$ 和 $S(S^-)$ 作为 $G_{n,n}$ 上的升降操作符，以获得所有格林函数矩阵元素。

9. 总结

我们考虑了计算表面格林函数的各种方法。在我们的统一处理中，很容易看出，这些方法本质上相当于计算与表面有关的自能的不同方法。递归方法是最古老的，也是最慢的，但它有一个优点，即它可以应用于非均一系统，实际上可以逐层构建系统的格林函数。如果系统是由相同的层构成的，迭代法提供了一种非常实用和方便的加速计算的可能性。它绕过了波函数的计算和复杂的带结构。如果需要波函数，特征值法是更好的选择，因为它允许波函数和格林函数的计算在一个步骤。它也可以是更高精度应用的最快方法。

10. matlab 代码

10.1 递归和迭代

```
clc
clear
H0=0;
H1=1;
eta=0.01;
Im_gr = [];
Re_gr = [];
for E = -3:0.1:3
    g_temp = 0;
    for jj=1:10000
        g_temp=inv(E+1j*eta-H0-H1*g_temp*H1');
    end
    Re_gr = [Re_gr,real(g_temp)];
    Im_gr = [Im_gr,imag(g_temp)];
    end plot(1:length(Re_gr),Re_gr);
    hold on;
    plot(1:length(Im_gr),Im_gr);
    legend('gr','gi');
```

10.2 振幅转移矩阵

```

clc
clear H0 = 0;
H1 = 1;
H_1 = 1;
eta = 0.01;
Re_gr = [];
Im_gr = [];
for E = -3:0.1:3
    E
    % T = [0];
    T = 0;
    T_ = 0;
    u = -1/(H0-(E+1j*eta))*(H_1);
    v = -1/(H0-(E+1j*eta))*(H1);
    for jj=1:100000
        % T = [T,1/(1-v*T(end))*u];
        T = 1/(1-v*T)*u;
        T_ = 1/(1-u*T_)*v;
    end
    % g_temp = -1/(E-H0+(E-H1*T(end)));
    g_temp = -1/(H0-(E+1j*eta)+(H1)*T);
    Re_gr = [Re_gr,real(g_temp)];
    Im_gr = [Im_gr,imag(g_temp)];
end
plot(6*[1:length(Re_gr)]/length(Re_gr),Re_gr);
hold on;
plot(6*[1:length(Im_gr)]/length(Im_gr),Im_gr);
legend('gr','gi');

```

