

福岡工業大学 機関リポジトリ

FITREPO

Title	半無限系表面グリーン関数の高精度計算
Author(s)	宮田 考史
Citation	福岡工業大学情報学研究所所報 第28巻 P37-P40
Issue Date	2017-10
URI	http://hdl.handle.net/11478/770
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

Fukuoka Institute of Technology

半無限系表面グリーン関数の高精度計算

宮田 考史 (情報工学部情報工学科)

Accurate Computation of Surface Green's Functions for Semi-infinite Systems

Takafumi MIYATA (Department of Computer Science and Engineering, Faculty of Information Engineering)

Abstract

We consider computing surface Green's functions for semi-infinite systems. In particular, we target the functions on multilayered periodic structures, which play an important role in the design of nano-scale electronic devices and in solid-state physics. To compute the functions, one has to solve the eigenvalue problem of particular matrices. This problem is small-scale but difficult to solve due to numerical errors. Starting from the observation that perturbations added into the matrices cause inaccurate computation, we consider an approach to addressing the numerical issue.

Keywords Electronic states at surfaces, Eigenvalue problems, Accurate algorithm

1. はじめに

本稿では、半無限系表面グリーン関数の計算を扱う。特に、多層周期構造における関数の計算を対象とする。表面グリーン関数はナノスケールの電子デバイス設計や固体物理学において重要な役割を果たす。例えば、伝導特性を解析するには、原子のタイトバインディングモデルを用いたアプローチにおいて、グリーン関数法が広く用いられている。この手法を利用するためには、原子構造や電子軌道と併せて、表面グリーン関数が必要である。また、量子伝導デバイスのトンネル電流を評価する際にも表面グリーン関数が利用されており、トンネル磁気抵抗素子¹⁾や、トンネル電界効果トランジスタなどの例がある。なお、トンネル伝導特性は、リカーシブグリーン関数法、Kubo-Landauer 公式^{2,3)}を用いて、表面グリーン関数から計算される。

上記のように、表面グリーン関数は、伝導特性の解析やトンネル電流の計算に有用である。これらに加え、表面グリーン関数の特徴は、関数から表面付近の電子状態密度が得られる点である。電子状態密度は、電子構造の解析に必要であるが、関数の計算結果を検証する際にも役立つ。物理的には、電子状態密度は非負の値であるため、もし計算結果に負の値が含まれていれば、表面グリーン関数の計算精度は低いため、様々な物理特性の数値シミュレーションに用いることはできない。

表面グリーン関数の計算手法の開発は、文献^{4,5)}が詳しい。特に、Umerski のアルゴリズム⁶⁾は、物理的な近似を用いることなく、関数を計算可能である。このアルゴリズムを用いた電子構造の解析例としては、文献^{3,7)}がある。

Umerski のアルゴリズムは、3つのステップで構成される。最初のステップとして、解析対象の物理特性を反映した正方行列が生成される。次に、この行列の固有値問題が求解され、最後に固有対の計算結果から表面グリーン関数が求められる。

Umerski のアルゴリズムを用いて表面グリーン関数を計算した場合、その計算結果が物理的な制約を満たさない例が報告されている⁸⁾。具体的には、第1ステップにおいて数値誤差から行列に摂動が加えられ、第2ステップにおける固有対の計算結果に影響を与える。この変更された固有対を用いて、表面グリーン関数が第3ステップにおいて計算される。このような関数から計算された電子状態密度は負の値を示すことがあり、その場合、関数の計算結果に多大な数値誤差が含まれている。

本稿では、表面グリーン関数を高精度に求めることを目的として、Umerski のアルゴリズムに対する修正を述べる。修正の方針は、数値誤差による摂動が行列に加算されることを防ぐことである。具体的には、第1ステップにおける行列の陽的な生成を行うことなく、行列の固有対を求めることを考える。このようなアプローチによって、単層構造の表面グリーン関数を高精度に計算可能であることが示された⁸⁾。ただし、その適用範囲は単層構造に限られる。本稿では、多層周期構造に適用可能な高精度アルゴリズムを扱う。

本稿の構成は以下の通りである。2節では、表面グリーン関数を計算するための Umerski のアルゴリズムを紹介する。3節では、高精度計算を目的としたアルゴリズムの修正について述べる。最後に、4節でまとめを述べる。

本稿で用いる記号を以下に定義する。

- 自然数 i, j に対して, $i \% j$ は i を j で割ったときの余りをあらわす。
- 複素数 z の虚部を $\text{Im}(z)$ で記す。
- 与えられた自然数 n に対して, $n \times n$ 単位行列を I とする。
- $n \times n$ 零行列を O , 長さ $2n$ の零ベクトルを $\mathbf{0}$ とする。
- 与えられた一続きの行列において k 番目の行列を G_k とあらわし, その (i, j) 要素を $g_{k(i,j)}$ と記す。
- 行列 G の転置および複素共役転置は, それぞれ G^T, G^* とあらわす。

2. 表面グリーン関数の計算

電子構造を解析するため, 半無限系表面グリーン関数の計算が必要である。ここでは, 多層周期構造を扱い, 表面グリーン関数を G , 層の周期数を m と記す。例えば Fe は $m = 1$ であり, 最近傍タイトバインディングモデルにおける Si, GaAs, グラフェンは $m = 2$ の例である。

まず, G の定義を示すための準備を行う。 $j = 1, \dots, m$ として, j 番目の層に対応する入力行列の組を $\{T_j, H_j\}$ とする。ここで, T_j は $n \times n$ の正則行列であり, $j+1$ 番目の層から j 番目の層への中間層の飛び移り積分によって与えられる。なお, T_j^* は, j 番目の層から $j+1$ 番目の層への飛び移り積分に対応する。また, $n \times n$ 行列 H_j は, オンサイトのポテンシャルエネルギーおよび飛び移り積分を含んだハミルトニアンによって与えられる。ここで,

$$V_j := (\varepsilon + \varepsilon_0 \sqrt{-1})I - H_j \quad (j = 1, \dots, m)$$

とする。ただし, ε は対象とするエネルギー状態に対応する実数であり, ε_0 は微小な正の数である。一般に, i 番目の層は, 入力行列の組

$$\{T_k, V_k\}, \quad k = (i-1) \% m + 1$$

に対応する。

上記の元に, 半無限系における表面グリーン関数 G は, リカーシブグリーン関数法によって与えられる。すなわち, 次の関数列

$$\begin{aligned} G_1 &:= (V_1 - T_1^* G_2 T_1)^{-1}, \\ G_2 &:= (V_2 - T_2^* G_3 T_2)^{-1}, \\ &\vdots \\ G_i &:= (V_k - T_k^* G_{i+1} T_k)^{-1} \end{aligned}$$

において, $i \rightarrow \infty$ のときの G_1 を, G とする。

Umerski は, Möbius 変換を行列形式に拡張することで, G の計算法を提案した⁶⁾。Umerski のアルゴリズムは, 物理的な近似を用いることなく, G を計算可能である。このアルゴリズムを用いて, 電子構造を解析した例としては, 文献^{3,7)}がある。アルゴリズムの概要を以下に示す。

Umerski のアルゴリズム⁶⁾

入力: 上記のように, $m, \{T_j, V_j\}_{j=1}^m$ を与える。

ステップ 1: 次の行列方程式をそれぞれ解く:

$$M_{1,j} T_j = I \quad (j = 1, \dots, m), \quad (1)$$

$$M_{2,j} T_j = V_j \quad (j = 1, \dots, m). \quad (2)$$

ただし, $M_{1,j}, M_{2,j}$ は $n \times n$ の解行列である。

式 (1), (2) の解行列を用いて, 次の $2n \times 2n$ 行列を生成する:

$$M_j := \begin{bmatrix} O & M_{1,j} \\ -T_j^* & M_{2,j} \end{bmatrix} \quad (j = 1, \dots, m). \quad (3)$$

式 (3) の行列を用いて, 次の $2n \times 2n$ 行列を生成する:

$$M := M_m \cdots M_2 M_1. \quad (4)$$

ステップ 2: 式 (4) の行列 M の標準固有値問題を解く:

$$M \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{0}. \quad (5)$$

ただし, $\lambda \in \mathbb{C}$ は固有値, $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^{2n}$ は固有ベクトルである。以下, $(\lambda_k, \mathbf{x}_k)$ は, 固有値の絶対値 $|\lambda_k|$ が k 番目に大きな固有値と対応する固有ベクトルの組をあらわす ($k = 1, \dots, 2n$)。

ここでは, $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n$ が必要であり, これらの固有ベクトルを並べてできる行列を

$$[\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_n] = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix} \quad (6)$$

と記す。ただし, X_1, X_2 は $n \times n$ 行列である。

ステップ 3: 次の線形方程式を解く:

$$G X_2 = X_1. \quad (7)$$

ただし, G は $n \times n$ 行列である。行列 G を用いて, 次の実数が定義される:

$$\gamma_i := -\frac{1}{\pi} \text{Im}(g_{(i,i)}) \quad (i = 1, \dots, n). \quad (8)$$

出力 G は表面グリーン関数の計算結果であり, 実数 $\gamma_1, \dots, \gamma_n$ は G から計算された電子状態密度である。

物理的には、式 (8) の電子状態密度は非負

$$\gamma_i \geq 0 \quad (i = 1, \dots, n)$$

である。もし負の値が1つでも含まれていれば、 G は低精度の計算結果であることを示す。このような数値誤差の悪影響が生じる例は、文献⁸⁾で報告され、アルゴリズムの修正が示された。この修正版アルゴリズムは、物理的な制約条件を満たした表面グリーン関数を計算可能なことが実験的に確認された。ただし、アルゴリズムの適用範囲は、単層 $m = 1$ の場合に限定される。本稿では、多層 $m \geq 1$ に適用可能な高精度アルゴリズムを扱う。

3. 高精度計算

前節で述べた数値誤差について、その発生要因を次のように考える。

ステップ 1: 式 (4) の行列 M を計算する際、数値誤差が摂動として M に加わる。

ステップ 2: 行列 M の固有対の代わりに、摂動された行列の固有対が計算される。

ステップ 3: 固有対が変化したことで、表面グリーン関数 G も変化する。

具体的には、以下のようになる。

ステップ 1: 線形方程式 (1), (2) を数値的に解くことで、解行列 $M_{1,j}, M_{2,j}$ ($j = 1, \dots, m$) に数値誤差が加わる。この誤差をそれぞれ $\Delta M_{1,j}, \Delta M_{2,j}$ と記す。

上記の誤差により、式 (3) の M_j は、 $M_j + \Delta M_j$ に変化する。ただし、

$$\Delta M_j = \begin{bmatrix} O & \Delta M_{1,j} \\ O & \Delta M_{2,j} \end{bmatrix} \quad (j = 1, \dots, m).$$

従って、式 (4) の行列 M は、下記の行列に変化する。

$$M + \Delta M := (M_m + \Delta M_m) \cdots (M_2 + \Delta M_2)(M_1 + \Delta M_1)$$

なお、数値計算を行う際には、個々の行列積の演算によって生じる数値誤差も摂動項 ΔM に累積する。

ステップ 2: ステップ 1 の結果、 M の代わりに $M + \Delta M$ の固有対が計算される。そのため、式 (6) の X_1, X_2 は真の行列から変化する。

ステップ 3: 式 (7) より、 X_1, X_2 が変化したことで、 G も真の行列から変化する。

上記より、 G を精度良く求めるためには、 ΔM の影響を回避することが重要である。そこで、行列 M を陽的に生成することなく、 M の固有対を求めることを考える。具体的には、ステップ 1, 2 を取り除き、別の演算を以下のように構成する。

我々は、式 (5) の代わりに、次の固有値問題を解く：

$$A_{2m} A_{2m-1}^{-1} \cdots A_4 A_3^{-1} A_2 A_1^{-1} \mathbf{x} = \lambda \mathbf{x}, \quad \mathbf{x} \neq \mathbf{0}. \quad (9)$$

ただし、次の $2n \times 2n$ 行列を定義する：

$$A_{2j-1} := \begin{bmatrix} I & O \\ O & T_j \end{bmatrix} \quad (j = 1, \dots, m), \quad (10)$$

$$A_{2j} := \begin{bmatrix} O & I \\ -T_j^* & V_j \end{bmatrix} \quad (j = 1, \dots, m). \quad (11)$$

式 (1)–(3), (10), (11) より、以下の等式が成り立つ：

$$M_j = A_{2j} A_{2j-1}^{-1} \quad (j = 1, \dots, m). \quad (12)$$

式 (4), (12) より、式 (5) の固有値問題と式 (9) の固有値問題は同一である。よって、式 (5) の代わりに、式 (9) を解くことで、表面グリーン関数の計算が可能となる。すなわち、ステップ 1, 2 の代わりに、式 (9) の求解を行えばよい。これにより、行列 M の陽的な生成が不要となる。

式 (9) の固有値問題を解く際、係数行列の積を求める必要はない。つまり、個々の行列に対して、それぞれ変更を加えることで、固有対を計算可能である。実際、次の変換を行う $2n \times 2n$ のユニタリ行列 Q_1, \dots, Q_{2m} が存在する⁹⁾：

$$Q_{2j-1}^* A_{2j-1} Q_{2j} = R_{2j-1} \quad (j = 1, \dots, m), \quad (13)$$

$$Q_{2j+1}^* A_{2j} Q_{2j} = R_{2j} \quad (j = 1, \dots, m). \quad (14)$$

ただし、 $Q_{2m+1} = Q_1$ であり、 R_1, \dots, R_{2m} は上三角行列である。ここで、

$$R := R_{2m} R_{2m-1}^{-1} \cdots R_2 R_1^{-1} \quad (15)$$

とおくと、 R も上三角行列である。式 (13), (14) より、

$$\begin{aligned} R &= R_{2m} R_{2m-1}^{-1} \cdots R_2 R_1^{-1} \\ &= (Q_{2m+1}^* A_{2m} Q_{2m})(Q_{2m-1}^* A_{2m-1} Q_{2m})^{-1} \cdots \\ &\quad (Q_5^* A_4 Q_4)(Q_3^* A_3 Q_4)^{-1}(Q_3^* A_2 Q_2)(Q_1^* A_1 Q_2)^{-1} \\ &= Q_1^* (A_{2m} A_{2m-1}^{-1} \cdots A_4 A_3^{-1} A_2 A_1^{-1}) Q_1 \\ &= Q_1^* M Q_1. \end{aligned}$$

よって、 R は M の相似変換である。すなわち、 R の固有値は、式 (9) の固有値 λ に等しい。また、 R の固有ベクトルを \mathbf{y} とおくと、式 (9) の固有ベクトルは $\mathbf{x} = Q_1 \mathbf{y}$ である。以上をまとめると、式 (13), (14) の変換を求めた後、式 (15) の R を生成し、その固有対 (λ, \mathbf{y}) を求めることで、元の問題 (9) の固有対 (λ, \mathbf{x}) を求める。固有対を求めた後は、Umerski のアルゴリズムにおけるステップ 3 を実行し、表面グリーン関数を求める。

本節で紹介したアルゴリズムを用いて、実際に表面グリーン関数を求めた結果は、文献¹⁰⁾で報告された。特に、Umerskiのアルゴリズムが破綻する場合も、修正版のアルゴリズムは、物理的な制約を満たした関数を計算可能であり、その高精度性が実験的に確認された。なお、 $m = 1$ のとき、本節のアルゴリズムは、文献⁸⁾のアルゴリズムに帰着する。そのため、本研究の結果は、アルゴリズムの高精度性を維持しながら、その適用範囲を単層構造から積層構造へ拡大したことである。

4. まとめ

本稿では、多層周期構造における半無限系表面グリーン関数の計算方法を述べた。従来のアルゴリズムは3つのステップから構成されており、(1) 正方行列の生成、(2) 行列の固有対計算、(3) 固有対から表面グリーン関数を計算、が必要である。このアルゴリズムは物理的な近似を導入することなく、関数を算出することが可能であるが、計算機上で実行した場合、数値誤差による精度の悪化が生じる。すなわち、行列に対して摂動が加わることで、固有対が変化し、関数の計算精度が低下する。この数値的な課題に対して、我々は固有対の計算部分を再構成し、行列を陽的に生成することなく、固有対を求めることで、従来よりも高精度なアルゴリズムを導入した。

謝辞

本研究の一部は、福岡工業大学情報科学研究所の平成28年度研究費の支援を受けた。

References

- 1) T. Miyazaki and N. Tezuka. Giant magnetic tunneling effect in Fe/Al₂O₃/Fe junction. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 139(3):L231–L234, 1995.
- 2) P. A. Lee and D. S. Fisher. Anderson localization in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 47:882–885, 1981.
- 3) S. Honda, H. Itoh, J. Inoue, H. Kurebayashi, T. Trypiniotis, C. H. W. Barnes, A. Hirohata, and J. A. C. Bland. Spin polarization control through resonant states in an Fe/GaAs Schottky barrier. *Phys. Rev. B*, 78:245316, 2008.
- 4) S. Datta. *Electronic Transport in Mesoscopic Systems*. Cambridge University Press, 1997.
- 5) 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. *J. Phys.: Condens. Matter*, 16:R637–R657, 2004.
- 6) A. Umerski. Closed-form solutions to surface Green's functions. *Phys. Rev. B*, 55:5266–5275, 1997.
- 7) G. Autès, J. Mathon, and A. Umerski. Theory of tunneling magnetoresistance of Fe/GaAs/Fe(001) junctions. *Phys. Rev. B*, 82:115212, 2010.
- 8) T. Miyata, R. Naito, and S. Honda. A numerical approach to surface Green's functions via generalized eigenvalue problems. *Jpn. J. Ind. Appl. Math.*, 30:653–660, 2013.
- 9) G. H. Golub and C. F. V. Loan. *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, 2012.
- 10) T. Miyata, R. Naito, and S. Honda. Computing surface green's functions for semi-infinite systems on multilayered periodic structures. *J. Engrg. Math.*, 97:25–32, 2016.

(平成29年7月20日受付)