第 30 卷 第 7 期　　物 理 学 报　　Vol. 30, No. 7
1981 年 7 月　　ACTA PHYSICA SINICA　　July, 1981

无限次微扰理论的分块矩阵法证明

郑 兆 勃
(中国科学技术大学物理系)

1980 年 11 月 18 日收到

提　　要

无限次微扰理论是求解无序体系格林函数的理论方法．此方法是吴式玉教授及其合作者们用“图式法”获得的．

本文采用把矩阵分块，求解子矩阵方程的方法，推导了这一理论的结果，从而给出了这一理论的矩阵代数证明．

一、引　　言

许多物理问题的求解，最终都归结为求解本征值和本征矢．对于无序体系，如无序合金、非晶半导体，金属玻璃等，由于不具有长程有序，因此传统的基于周期结构的求解方法失效．无序体系问题是绝对的多体问题．求解这类问题：一种方法是数值计算方法[1,2]；另一种方法是解析求解．自 1968 年以来，吴式玉等人从研究一维无序体系，求解三对角矩阵问题开始，发展了一整套解析求解方法，即格林函数方法，或称无限次微扰理论[3]．后来，又把这一方法推广到三对角分块矩阵的求解[4]．这些理论方法已经在晶格振动、表面电子态、生物大分子等方面获得了应用，而且为进一步发展无序体系理论，处理更为复杂的问题，打下了理论基础．

无限次微扰理论的一系列公式，是基于“图式方法”获得的．本文从另一个角度，即用矩阵分块求解的方法，推导出了由图式方法得出的求解格林函数的全部公式．从而给出了这些公式的矩阵代数证明．这也说明，矩阵分块求解，是求解无序体系问题的另一种有效方法．

二、图式法求解格林函数的主要结论

在 1974 年，由 Wu, Tung, Schwartz[3] 得出了求解三对角矩阵格林函数的公式；1979 年，由 Dy, Wu, Spratllin[4] 把结论推广到了三对角分块矩阵．

由于三对角矩阵是三对角分块矩阵的特殊的最简单情况，所以我们只引用三对角分块矩阵的主要结论，并用矩阵代数方法加以证明．

设矩阵 H，可以写成下述三对角分块矩阵形式：

$$H=\begin{bmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & & & & \\ & V_{-1\,-2} & h_{-1\,-1} & V_{-1\,0} & & & \\ & & V_{0\,-1} & h_{0\,0} & V_{0\,1} & & \\ & & & V_{1\,0} & h_{1\,1} & V_{1\,2} & \\ & & & & \cdot & \cdot & \cdot \end{bmatrix}, \tag{1}$$

其中 h_{ii} 为方形子矩阵，为 $n\times n$ 阶．在应用中，为求解H的本征方程:

$$Hu=Eu. \tag{2}$$

格林函数或预解式算符为

$$R(z)=(z-H)^{-1}. \tag{3}$$

当 $R(z)$ 求出后，由 $R(z)$ 对角元的极点可确定H的本征值．

求 $R(z)$ 方法为：把 $R(z)$ 也划分为与H相同形式的分块矩阵，即 $R_{nn'}$ 与 H 的分块矩阵元 V_{ij}，h_{ii}，具有完全相同的行与列．

由文献[4]可知，$R_{nn'}$ 可以写成

$$R_{nn'}=R_0(n)\delta_{nn'}+R_0(n)T_{nn'}R_0(n')+R_0(n)\sum_{n''}T_{nn''}R_0(n'')T_{n''n'}R_0(n')+\cdots, \tag{4}$$

其中

$$R_0(n)=(z-h_{nn})^{-1}, \tag{5}$$

$$T_{nn'}=V_{n,n+1}\delta_{n+1,n'}+V_{n,n-1}\delta_{n-1,n'}. \tag{6}$$

运用图式方法推导出了以下公式:

$$R_{nn}=[R_0^{-1}(n)-V_{n,n+1}\Delta_{n+1}^{+}V_{n+1,n}-V_{n,n-1}\Delta_{n-1}^{-}V_{n-1,n}]^{-1}, \tag{7}$$

$$\Delta_n^{\pm}=[R_0^{-1}(n)-V_{n,n\pm1}\Delta_{n\pm1}^{\pm}V_{n\pm1,n}]^{-1}, \tag{8}$$

$$R_{nn}=\Delta_n^{+}+\Delta_n^{+}V_{n,n-1}R_{n-1,n-1}V_{n-1,n}\Delta_n^{+}, \tag{9}$$

$$R_{nn}=\Delta_n^{-}+\Delta_n^{-}V_{n,n+1}R_{n+1,n+1}V_{n+1,n}\Delta_n^{-}, \tag{10}$$

$$R_{nn'}=R_{nn}V_{n,n\pm1}\Delta_{n\pm1}^{\pm}\cdots V_{n'\mp1,n'}\Delta_{n'}^{\pm}\quad (n'\gtrless n). \tag{11}$$

应该注意到，上边所有公式中，符号均为子矩阵，所以运算都是矩阵运算．

当其中子矩阵是一般数时，三对角分块矩阵化为一般三对角矩阵，上述公式全转化为一般三对角矩阵的公式．

对于本征矢，文献[5]得出了三对角矩阵本征矢的求解公式，

取 $b_l=1$，

$$b_{l\pm r}=\Delta_{l\pm r}^{\pm}V_{l\pm r,l\pm r\mp1}\cdots\Delta_{l\pm1}^{\pm}V_{l\pm1,l} \tag{12}$$

或

$$b_{l\pm r}=\frac{R_{l\pm r,l}}{R_{l,l}}, \tag{13}$$

b_j，$j=1,2,\cdots,N$ 是本征矢的N个分量．

归一化条件为

$$\sum_{j=1}^{N}b_j'^2=1. \tag{14}$$

用条件（14）式可以把 b_j 进一步归一化．

三、分块求解的一般方法

在这一部分中，我们将给出分块法求解矩阵本征方程本征值和本征矢的一般原则和公式. 当把这些方法应用于三对角分块矩阵时，即得到由图式方法所获得的上述全部公式，从而给出了图式方法的矩阵代数证明.

格林函数方法把问题归结于求 $R(z)=(z-H)^{-1}$，从矩阵代数角度看，即为求解矩阵 $(z-H)$ 的逆矩阵. 由逆矩阵对角元的极点即可决定本征值.

下边给出求逆矩阵的分块矩阵求解公式. 设 $N\times N$ 维矩阵元为 D_{ij}^{-1}, $i,j=1,2,\cdots,N$，逆矩阵元为 D_{ij}, $i,j=1,2,\cdots,N$. 决定逆矩阵元的方程为

$$\sum_{j=1}^{N} D_{ij}^{-1}D_{jk}=\delta_{ik} \qquad i,k=1,2,\cdots,N. \tag{15}$$

(15) 式表示$N\times N$个方程联立的方程组，决定$N\times N$个 D_{ij}, $i,j=1,2,\cdots,N$.
(15) 式可写成矩阵乘法形式

$$D^{-1}\times D=I,$$

即

$$\begin{bmatrix} D_{11}^{-1} & D_{12}^{-1} & \cdots & D_{1N}^{-1} \\ D_{21}^{-1} & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ D_{N1}^{-1} & \cdots\cdots & & D_{NN}^{-1} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & \cdots & D_{1N} \\ D_{21} & & & \vdots \\ \vdots & & & \vdots \\ D_{N1} & \cdots\cdots & & D_{NN} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & 1 \end{bmatrix}.$$

把矩阵 D^{-1}, D, I 进行分块，分块时必须满足以下条件:

1) 用平行于行与列，并贯穿于整个矩阵的直线划分;
2) 划分后三个矩阵对应位置的子矩阵具有完全相同的行数与列数;
3) 对角线上的子矩阵是方形矩阵，即该子矩阵的行与列数目相等.

当满足上述划分条件时，(15) 式可以写成子矩阵方程形式

$$\sum_{j=1}^{r} A_{ij}\cdot R_{jk}=I_r\delta_{ik} \qquad i,k=1,2,\cdots,r, \tag{16}$$

即

$$\left[\begin{array}{c|c|c} A_{11} & A_{12} & \cdots \\ \hline A_{21} & A_{22} & \\ \hline \vdots & & \end{array}\right] \times \left[\begin{array}{c|c|c} R_{11} & R_{12} & \cdots \\ \hline R_{21} & R_{22} & \\ \hline \vdots & & \end{array}\right] = \left[\begin{array}{c|c|c} I_1 & 0 & 0 \\ \hline 0 & I_2 & 0 \\ \hline 0 & 0 & \ddots \end{array}\right].$$

这里 I_r 是单位矩阵，其维数当 r 不同时可以不同; A_{ii} 都是方形矩阵. A_{ij}, R_{ij} 具有相同的行数与列数，或者说它们的“形状”与“大小”均相同. $A_{ik}(i=1,2,\cdots,N)$ 具有相同的横行数; $A_{ik}(k=1,2,\cdots,N)$ 具有相同的纵列数，因为是由直线来划分的.

为了证明 (15) 式，当按上述三个原则划分时可以写成 (16) 式形式，只需把 (16) 式

中子矩阵按矩阵乘法展开即可得到(15)式.

下边我们把求解本征矢的方程也写成分块子矩阵方程形式.

决定本征矢的方程为

$$\sum_{j=1}^{N} D_{ij}^{-1}\cdot C_j=0 \qquad j=1,2,\cdots,N. \tag{17}$$

由于有 $|D^{-1}|=0$. 所以由(17)式所表示的 N 个线性方程中只有 $(N-1)$ 个是独立的，只可解出 $(N-1)$ 个 C_j 之间的比例. 即可以决定

$$\frac{C_j}{C_l}(j=1,2,\cdots,l-1,l+1,\cdots,N,\ \text{其中}\ C_l\neq 0).$$

再由归一化条件

$$\sum_{j=1}^{N} C_j^2=1$$

可决定归一化了的本征矢.

令 $b_l=C_j/C_l$, $b_l=1$, (17)式写为

$$\sum_{j=1}^{N} D_{ij}^{-1}b_j=0$$

或

$$\sum_{\substack{j=1\\ j\neq l}}^{N} D_{ij}^{-1}b_j=-D_{il}^{-1} \qquad i=1,2,\cdots,l-1,l+1,\cdots,N. \tag{18}$$

(18)式可以写成矩阵乘积形式

$$D_1^{-1}\times B=E, \tag{19}$$

$$\begin{bmatrix} D_{11}^{-1} & \cdots D_{1,l-1}^{-1}, & D_{1,l+1}^{-1} & \cdots D_{1,N}^{-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ D_{l-1,1}^{-1} & \cdots D_{l-1,l-1}^{-1}, & D_{l-1,l+1}^{-1} & \cdots D_{l-1,N}^{-1} \\ D_{l+1,1}^{-1} & D_{l+1,l-1}^{-1}, & D_{l+1,l+1}^{-1} & \cdots D_{l+1,N}^{-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ D_{N,1}^{-1} & \cdots D_{N,l-1}^{-1} & D_{N,l+1}^{-1} & \cdots D_{N,N}^{-1} \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_{l-1} \\ b_{l+1} \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -D_{1,l}^{-1} \\ \vdots \\ -D_{l-1,l}^{-1} \\ -D_{l+1,l}^{-1} \\ \vdots \\ -D_{N,l}^{-1} \end{bmatrix}. \tag{20}$$

把 D_1^{-1}, B, E 进行分块. 由于 B, E 都不是方形矩阵，分块原则为满足下述条件：设有三个矩阵 A, B, C, 且 $A\times B=C$. 由于有

$$\sum_{j=1} A_{ij}B_{jk}=C_{ik},$$

则 A 如为 $M\times N$ 维，B 为 $N\times L$ 维，C 必为 $M\times L$ 维. 把 A, B, C 分块时，原则为

1) A 的横行划分情况与 C 的横行划分情况相同；

2) A 的纵列划分情况与 B 的横行划分情况相同；

3) B 的纵列划分情况与 C 的纵列划分情况相同.

例如：A 划分为 4×2; B 划分为 2×4; C 划分为 4×4.

$$
\begin{array}{ccccc}
A & \times & B & = & C,\\
\begin{array}{|c|c|}\hline A_{11} & A_{12}\\ \hline A_{21} & A_{22}\\ \hline A_{31} & A_{32}\\ \hline A_{41} & A_{42}\\ \hline\end{array}
& \times &
\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline B_{11} & B_{12} & B_{13} & B_{14}\\ \hline B_{21} & B_{22} & B_{23} & B_{24}\\ \hline\end{array}
& = &
\begin{array}{|c|c|c|c|}\hline C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14}\\ \hline C_{21} & C_{22} & C_{23} & C_{24}\\ \hline C_{31} & C_{32} & C_{33} & C_{34}\\ \hline C_{41} & C_{42} & C_{43} & C_{44}\\ \hline\end{array}.
\end{array}
$$

依照上述原则，就可以写成分块子矩阵方程. 如：$A \times B = C$，即可写成子矩阵乘积形式：

$$\sum_j A_{ij}B_{jk} = C_{ik},$$

其中 A_{ij}, B_{ij}, C_{ij} 均为子矩阵.

在(20)式中，D_1^{-1} 为 $(N-1)\times(N-1)$ 维；B, E 均为 $(N-1)\times 1$ 维.

为了在求本征矢时可以利用求解本征值时的结果，我们可以把 D_1^{-1} 划分的情况与 D^{-1} 尽量相同. 例如当取 $l=1$ 时，D_1^{-1} 可划分为

$$D_1^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} A_{22} & A_{23}\cdots \\ \hline A_{32} & A_{33}\cdots \\ \vdots & \vdots \end{array}\right], \text{ 而 } D^{-1} = \left[\begin{array}{c|c|c} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ \hline A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ \hline A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{array}\right].$$

这里 A_{11} 为 D_{11}^{-1}. 此时，D_1^{-1} 为 D^{-1} 的一个子矩阵.

当我们把矩阵方程都写成了子矩阵方程之后，问题归结为如何求解子矩阵方程式了.

首先推导四分法的解. 对方程(16). 四分法时子矩阵方程为

$$\sum_{r=1}^{2} A_{ij}\times R_{jk} = I_r\delta_{ik} \quad i, k = 1, 2.$$

即为

$$A_{11}\times R_{11} + A_{12}\times R_{21} = I, \tag{21.1}$$

$$A_{21}\times R_{12} + A_{22}\times R_{22} = I, \tag{21.2}$$

$$A_{11}R_{12} + A_{12}\times R_{22} = 0, \tag{21.3}$$

$$A_{21}\times R_{11} + A_{22}\times R_{21} = 0. \tag{21.4}$$

注意其中 A_{11}, A_{22}, R_{11}, R_{22} 为方形矩阵. 设它们的矩阵行列式之值不为零，即它们不是奇异矩阵. 用 A_{11}^{-1} 左乘(21.3)式，有

$$R_{12} + A_{11}^{-1}A_{12}R_{22} = 0,$$

$$R_{12} = -A_{11}^{-1}A_{12}R_{22}. \tag{22}$$

把(22)式代入(21.2)式，有

$$-A_{21}(A_{11}^{-1}A_{12}R_{22}) + A_{22}R_{22} = I. \tag{23}$$

由于有

$$-A_{21}(A_{11}^{-1}A_{12}R_{22}) = -(A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})R_{22},$$

故有

$$(A_{22}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})R_{22}=I. \tag{24}$$

用 $(A_{22}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^{-1}$ 左乘 (24) 式，有

$$R_{22}=(A_{22}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^{-1}. \tag{25}$$

同理可得

$$R_{11}=(A_{11}-A_{12}A_{22}^{-1}A_{21})^{-1}, \tag{26}$$

$$R_{12}=-A_{11}^{-1}A_{12}R_{22}, \tag{27}$$

$$R_{21}=-A_{22}^{-1}A_{21}R_{11}. \tag{28}$$

又由于对方形非奇异矩阵有 $A^{-1}\times A=A\times A^{-1}=I$. 所以方程 (16) 又可写成

$$\sum_{r=1}^{2}R_{ij}\times A_{jk}=I_r\delta_{ik} \qquad i,k=1,2.$$

同理可推导出

$$R_{12}=-R_{11}A_{12}A_{22}^{-1}, \tag{29}$$

$$R_{21}=-R_{22}A_{21}A_{11}^{-1}. \tag{30}$$

还可以推导出两个极为有用的表示式.

由 (27) 式有

$$R_{22}=(A_{22}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})^{-1},$$

即为

$$R_{22}A_{22}-R_{22}A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}=I.$$

用

$$R_{21}=-R_{22}A_{21}A_{11}^{-1}$$

和

$$R_{21}=-A_{22}^{-1}A_{21}R_{11}$$

代入可得

$$R_{22}=A_{22}^{-1}+A_{22}^{-1}A_{21}R_{11}A_{12}A_{22}^{-1}. \tag{31}$$

同理可得

$$R_{11}=A_{11}^{-1}+A_{11}^{-1}A_{12}R_{22}A_{21}A_{11}^{-1}. \tag{32}$$

(25)—(32) 式给出了四分法所有子矩阵的求解表示式.

用完全相同的方法可以推导九分法或更高次划分的解，对于九分法我们仅写出其中几个：

$$\begin{aligned}R_{22}=[&(A_{22}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12})-(A_{23}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{13})\\&\cdot(A_{33}-A_{31}A_{11}^{-1}A_{13})^{-1}(A_{32}-A_{31}A_{11}^{-1}A_{12})]^{-1},\end{aligned} \tag{33}$$

$$R_{32}=-(A_{33}-A_{31}A_{11}^{-1}A_{13})^{-1}(A_{32}-A_{31}A_{11}^{-1}A_{12})R_{22}, \tag{34}$$

$$R_{12}=-A_{11}^{-1}A_{12}R_{22}-A_{11}^{-1}A_{13}R_{32}. \tag{35}$$

对于三对角情况，即当 $A_{13}=0$, $A_{31}=0$ 时，有

$$R_{22}=[A_{22}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}-A_{23}A_{33}^{-1}A_{32}]^{-1}, \tag{36}$$

$$R_{21}=-R_{22}A_{21}A_{11}^{-1}, \tag{37}$$

$$R_{12}=-A_{11}^{-1}A_{12}R_{22}, \tag{38}$$

$$R_{32} = -A_{33}^{-1}A_{32}R_{22}, \tag{39}$$

$$R_{23} = -R_{22}A_{23}A_{33}^{-1}. \tag{40}$$

在以上公式的推导过程中，只依照矩阵运算的规律，因此所得到的结果具有较大的普遍性.

也注意到，为了能得到逆矩阵各子矩阵的表示式，需要用左乘和右乘逆矩阵的方法.而只有非奇异的方形矩阵才具有逆矩阵，且有 $A^{-1}\cdot A = A\cdot A^{-1} = I$，这说明分块时方形子矩阵的重要性.

四、无限次微扰理论结果的推导

我们把上面用分块方法获得的子矩阵方程的解，应用于三对角分块矩阵时，即可得到(7)—(12)式的全部求格林函数和本征矢的公式，从而给出了图式方法结果的矩阵代数分块方法的证明.

设有三对角分块矩阵 H'，

$$H' = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & & & \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{N-2,N-1} & a_{N-1,N-1} & a_{N-1,N} \\ & & & a_{N,N-1} & a_{N,N} \end{bmatrix} \tag{41}$$

(此处 H' 与 (1) 式 H 关系为 $H' \sim H - E$).

H' 中 a_{ii} 均为方形子矩阵，但维数不一定相同；a_{ij} 不一定为方形矩阵.

设 H' 的逆矩阵为 R' (R' 与 (3) 式关系为 $R' \sim R$)，把 H' 和 R' 划分成九个大的子矩阵

$$H' = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{bmatrix}, \quad R' = \begin{bmatrix} R'_{11} & R'_{12} & R'_{13} \\ R'_{21} & R'_{22} & R'_{23} \\ R'_{31} & R'_{32} & R'_{33} \end{bmatrix},$$

其中使

$$A_{22} = a_{nn}, \quad A_{21} = [0 \ \cdots \ 0 \ a_{n-1,n}], \quad A_{23} = [a_{n,n+1}, \ 0 \cdots 0],$$

$$A_{11} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & & & \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & \cdot & \cdot & a_{n-2,n-1} \\ & & & a_{n-2,n-1} & a_{n-1,n-1} \end{bmatrix},$$

$$A_{33} = \begin{bmatrix} a_{n+1,n+1} & a_{n+1,n+2} & & \\ a_{n+1,n+2} & a_{n+2,n+2} & a_{n+2,n+2} & \\ & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & a_{N-1,N} & a_{N,N} \end{bmatrix},$$

$$A_{12}=\begin{bmatrix}0\\0\\\vdots\\0\\a_{n-1,n}\end{bmatrix},\quad A_{32}=\begin{bmatrix}a_{n+1,n}\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix},\quad A_{13}=0,\quad A_{31}=0.$$

由于 $A_{31}=0$, $A_{13}=0$, 可以用九分法公式中的 (36) 式有

$$R'_{22}=R_{nn}=[A_{22}-A_{21}A_{11}^{-1}A_{12}-A_{23}A_{33}^{-1}A_{32}]^{-1}.$$

把 A_{22}, A_{21}, A_{11}, A_{12}, A_{23}, A_{33}, A_{32} 的表示式代入有

$$R_{nn}=\left\{a_{nn}-[0\cdots0,\ a_{n,n-1}]\begin{bmatrix}\ddots&&\\&\ddots&\\&&a_{n-2,n-2}&a_{n-2,n-1}\\&&a_{n-1,n-2}&a_{n-1,n-1}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}0\\\vdots\\0\\a_{n-1,n}\end{bmatrix}\right.$$

$$\left.-[a_{n,n+1}\ 0\cdots0]\begin{bmatrix}a_{n+1,n+1}&a_{n+1,n+2}&&\\a_{n+2,n+1}&a_{n+2,n+2}&a_{n+2,n+3}&\\&\ddots&\ddots&\ddots\\&&\ddots&\ddots&\ddots\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}a_{n+1,n}\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix}\right\}^{-1}.$$

把上式中矩阵乘积求出，即有

$$R_{nn}=[a_{nn}-a_{n,n-1}\Delta_{n-1}^{-}a_{n-1,n}-a_{n,n+1}\Delta_{n+1}^{+}a_{n+1,n}]^{-1},$$

其中 Δ_{n-1}^{-} 是矩阵 A_{11}^{-1} 的右下角第一个元素；Δ_{n+1}^{+} 是矩阵 A_{33}^{-1} 的左上角第一个元素.

下边求 Δ_{n-1}^{-} 和 Δ_{n+1}^{+} 的表示式. 把矩阵 A_{11} 用四分法划分为

$$A_{11}=\left[\begin{array}{ccc|c}&&&\vdots\\\ddots&\ddots&\ddots&0\\&\ddots&a_{n-2,n-2}&a_{n-2,n-1}\\\hline\cdots&0&a_{n-1,n-2}&a_{n-1,n-1}\end{array}\right].$$

用四分法公式 (25) 有

$$\Delta_{n-1}^{-}=\left\{a_{n-1,n-1}-[0\cdots0\ a_{n-1,n-2}]\begin{bmatrix}\ddots&\ddots&\ddots&\\&\ddots&a_{n-3,n-3}&a_{n-3,n-2}\\&&a_{n-2,n-3}&a_{n-2,n-2}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}0\\\vdots\\0\\a_{n-2,n-1}\end{bmatrix}\right\}^{-1},$$

故
$$\Delta_{n-1}^{-}=(a_{n-1,n-1}-a_{n-1,n-2}\Delta_{n-2}^{-}a_{n-2,n-1})^{-1},$$

其中 Δ_{n-2}^{-} 是矩阵 $\begin{bmatrix}\ddots&\ddots&\ddots&\\&\ddots&a_{n-3,n-3}&a_{n-3,n-2}\\&&a_{n-2,n-3}&a_{n-2,n-2}\end{bmatrix}^{-1}$ 右下角第一个元素.

同理，

$$\Delta_{n+1}^{+}=(a_{n+1,n+1}-a_{n+1,n+2}\Delta_{n+2}^{+}a_{n+2,n+1})^{-1}.$$

下面求非对角元.

由(38)式有

$$\begin{bmatrix} R_{1n} \\ \vdots \\ \vdots \\ \\ R_{n-1,n} \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} & & & \\ & & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ & \cdot & a_{n-2,n-2} & a_{n-2,n-1} \\ & & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \\ a_{n-1,n} \end{bmatrix} \cdot R_{nn},$$

故有

$$R_{n-1,n}=-\Delta_{n-1}^{-}a_{n-1,n}R_{nn},\quad R_{n-2,n}=-\Delta_{n-2,n-1}^{-}a_{n-1,n}R_{nn},$$

其中 Δ_{n-1}^{-}, $\Delta_{n-2,n-1}^{-}$ 的定义为

$$\begin{bmatrix} & & & \\ & & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & \\ & \cdot & a_{n-2,n-2} & a_{n-2,n-1} \\ & & a_{n-1,n-2} & a_{n-1,n-1} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} & \\ & \\ \cdots & \Delta_{n-3,n-1}^{-} \\ \cdots & \Delta_{n-2,n-1}^{-} \\ \cdots & \Delta_{n-1}^{-} \end{bmatrix}.$$

又因为

$$\Delta_{n-2,n-1}^{-}=-\Delta_{n-2}^{-}a_{n-2,n-1}\Delta_{n-1}^{-},$$

其中 Δ_{n-2}^{-} 是以 $a_{n-2,n-2}$ 为右下角的矩阵的逆矩阵右下角第一个元素. 所以有

$$R_{n-l,n}=(-1)^{l}\Delta_{n-l}^{-}a_{n-l,n-l-1}\cdots a_{n-1,n}R_{nn}.$$

同理有

$$R_{n+l,n}=(-1)^{l}\Delta_{n+l}^{+},\ a_{n+l,n+0-1}\cdots R_{nn}.$$

同理也可推出

$$R_{n,n+l}=(-1)^{l}R_{nn}a_{n,n+1}\Delta_{n+1}^{+}\cdots\Delta_{n+l}^{+},$$
$$R_{n,n-l}=(-1)^{l}R_{nn}a_{n,n-1}\Delta_{n-1}^{-}\cdots\Delta_{n-l}^{-}.$$

当 $l=1$ 时有

$$R_{n-1,n}=-\Delta_{n-1}^{-}a_{n-1,n}R_{nn},\quad R_{n-1,n}=-R_{n-1,n-1}a_{n-1,n}\Delta_{n}^{+}.$$

即为

$$\Delta_{n-1}^{-}a_{n-1,n}R_{nn}=R_{n-1,n-1}a_{n-1,n}\Delta_{n}^{+}.$$

又因为

$$R_{nn}=(a_{nn}-a_{n,n+1}\Delta_{n+1}^{+}a_{n+1,n}-a_{n,n-1}\Delta_{n-1}^{-}a_{n-1,n})^{-1}$$

和

$$\Delta_{n}^{+}=(a_{nn}-a_{n,n+1}\Delta_{n+1}^{+}a_{n+1,n})^{-1},$$

所以有

$$R_{nn} = [(\Delta_n^+)^{-1} - a_{n,n-1}\Delta_{n-1}^- a_{n-1,n}]^{-1}$$

和

$$R_{nn} = \Delta_n^+ + \Delta_n^+ a_{n,n-1} R_{n-1,n-1} a_{n-1,n} \Delta_n^+.$$

同理可证

$$R_{nn} = \Delta_n^- + \Delta_n^- a_{n,n+1} R_{n+1,n+1} a_{n+1,n} \Delta_n^-.$$

以上即已推导出在第二部分中的全部求解格林函数的公式.

当其中 a_{ij} 为一般数而不是子矩阵时，上述公式即为最初由一般三对角矩阵所得到的无限次微扰理论的全部公式.

下面推导一般三对角矩阵求解本征矢的公式.

对三对角矩阵. 本征矢方程为 $(b_l = 1)$

$$\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & & & & & \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & & & \\ & & a_{l-1,l-2} & a_{l-1,l-1} & & & \\ & & & & a_{ll} & a_{l,l+1} & \\ & & & & a_{l+1,l} & a_{l+1,l+1} & \\ & & & & & \cdot & \cdot \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_{l-1} \\ b_{l+1} \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vdots \\ 0 \\ -a_{l-1,l} \\ -a_{l+1,l} \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix}.$$

用四分法把 $(N-1)\times(N-1)$ 分为四个子矩阵

$$A_{11} = \begin{bmatrix} a_{11} & \cdot & & & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \\ & & & & \cdot & a_{l-1,l-1} \end{bmatrix} \quad A_{22} = \begin{bmatrix} a_{ll} & \cdot & & & \\ \cdot & \cdot & \cdot & & \\ & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot \\ & & & \cdot & a_{NN} \end{bmatrix},$$

$$A_{12} = 0, \quad A_{21} = 0.$$

B, E 分为

$$B = \left[\frac{B_1}{B_2}\right], \quad E = \left[\frac{E_1}{E_2}\right].$$

按分块原则，

$$B_1 = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_{l-1} \end{bmatrix}, \quad B_2 = \begin{bmatrix} b_{l+1} \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix},$$

$$E_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -a_{l-1,l} \end{bmatrix}, \quad E_2 = \begin{bmatrix} -a_{l+1,l} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}.$$

子矩阵方程为

$$A_{11}B_1 + A_{12}B_2 = E_1,$$
$$A_{21}B_1 + A_{22}B_2 = E_2.$$

因为 $A_{12} = 0$, $A_{21} = 0$，而 A_{11}, A_{22} 为方形矩阵．故

$$A_{11}B_1 = E, \text{ 有 } B_1 = E_1A_{11}^{-1}; \tag{42}$$
$$A_{22}B_2 = E_2, \text{ 有 } B_2 = E_2A_{22}^{-1}. \tag{43}$$

由 (42) 和 (43) 式有

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_{l-1} \end{bmatrix} = A_{11}^{-1} \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ -a_{l-1,l} \end{bmatrix}.$$

所以有

$$b_{l-1} = -\Delta_{l-1}^{-} a_{l-1,l},$$
$$b_{l-2} = \Delta_{l-2}^{-} a_{l-2,l-1} \Delta_{l-1}^{-} a_{l-1,l}$$
$$b_{l-r} = (-1)^r \Delta_{l-r}^{-} a_{l-r,l-r-1} \cdots \Delta_{l-1}^{-} a_{l-1,l}.$$

又由

$$\begin{bmatrix} b_{l+1} \\ \vdots \\ b_N \end{bmatrix} = A_{22}^{-1} \begin{bmatrix} -a_{l+1,l} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix},$$

所以有

$$b_{l+1} = -\Delta_{l+1}^{+} a_{l+1,l},$$
$$b_{l+2} = \Delta_{l+2}^{+} a_{l+2,l+1} \Delta_{l+1}^{+} a_{l+1,l},$$
$$b_{l+r} = (-1)^r \Delta_{l+r}^{+} a_{l+r,l+r-1} \cdots \Delta_{l+1}^{+} a_{l+1,l}.$$

总之有

$$b_{l\pm r} = \frac{R_{l\pm r,l}}{R_{ll}}. \tag{44}$$

(44) 式由 $R_{l\pm r,l}$, R_{ll} 表示式的对比中可以十分明显地得到．

五、结 语

本文给出了分块方法求解矩阵子矩阵方程的一般原则和方法，用这一方法所得到的表示式推导出了求解无序体系的求格林函数的公式，从而给出了这些表示式的矩阵代数方法证明．这也给出了求解无序体系问题的另一条思路．

本文是在美国肯塔基州路易维尔大学物理系完成，得到了吴式玉教授的热情指导和帮助，谨致谢忱．

参 考 文 献

[1] P. Dean, *Proc. Roy. Soc.*, **254**(1960), 507.
[2] P. Dean, *Rev. Mod. Phys.*, **44**(1972), 127.
[3] S. Y. Wu, C. C. Tung and M. Schwartz, *J. Math. Phys.*, **15**(1974), 938.
[4] K. S. Dy, S. Y. Wu and T. Spratllin, *Physical Review*, **20**(1979), 4237.
[5] K. S. Dy, S. Y. Wu and C. Wonglawatnugool, *J. Phys. C*, 12(1979), L141.

AN ALTERNATE PROOF OF THE INFINITE ORDER PERTURBATION THEORY BY MATRIX PARTITION

ZHENG ZHAO-BO
(Department of Physics, University of Science and Technology of China)

ABSTRACT

Recently, Wu and his coworkers formulated an infinite order perturbation theory for solving the Green's function of a disordered system, using a diagrammatic technique. In this paper, the method of matrix partition is used to obtain the same series of recursion relations, thus providing an algebraic proof for the theory.