第 54 卷 第 6 期 2005 年 6 月
1000-3290/2005/54(06)/2540-05
物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA
Vol.54,No.6,June,2005

碳纤维混凝土中的隧道电流*

罗来龙
(武汉理工大学理学院,武汉 430063)

(2004 年 10 月 11 日收到)

针对碳纤维混凝土中隧道体系,提出了一个运用变分法近似处理的方案,通过 Löwdin 变换得到了隧道体系的近似哈密顿量,并导出了势垒的隧道电流公式,为这方面的实验研究打下理论基础.

关键词:变分法,碳纤维,隧道效应,混凝土
PACC:0365G,7340G,1420C

1. 引 言

碳纤维混凝土(CFRC)是近 30 年来逐渐发展起来的新型复合机敏材料,因为材料的热电、压敏等诸多效应,使之成为最具开发潜力的新型机敏材料之一.它的导电性能由于与材料的机敏性密切相关而受到关注.有关 CFRC 导电机理的实验研究时有报道,对于 CFRC 导电的微观机制,通常用隧道说来定性解释[1,2].即隧道电子贯穿碳纤维间的势垒,沿碳纤维构成的导电团簇输运而形成电流.然而有关隧道电流的定量描述目前还难得一见.这就导致这样一个问题:如果承认隧道电流在 CFRC 导电过程中占主导地位,那么微观数学物理模型怎样给出?

本文试图从量子力学的角度来分析这一问题.鉴于问题的复杂性,分成两步进行:首先导出势垒上多粒子体系的隧道电流公式,然后给出 CFRC 试块上的电流,本文先完成第一步工作.为此,特作如下假设:

(1)考虑到纤维间绝缘层的性质对隧道电流的影响并不明显(远小于纤维间距离产生的影响),可略其结构,把它当成真空,把隧道体系视为由两部分组成的耦合体系.

(2)由于机敏 CFRC 中耦合较弱,这时耦合的效果除使电子在碳纤维间以一很小的概率跃迁之外,不至于引起其它性质(如电子密度、能隙)的明显改变(现有的实验研究支持这一物理图像[3]),因此以各种可能的无耦合态的线性叠加作为变分试探波函数,可望得到较好的近似.

(3)在隧道电流问题中,主要关注电子在耦合体系中的运动,略去离子运动及电子间的库仑作用.

于是可以把体系的哈密顿量写成单电子的哈密顿量之和:

$$H = \sum_i h_i ,$$

$$h_i = \frac{p_i^2}{2m} + u_l(\boldsymbol{x}_i) + u_r(\boldsymbol{x}_i), \tag{1}$$

其中 u_l,u_r 分别为左右碳纤维的等效晶格场[4],耦合的效果只表现为一边的电子会受到另一边的场作用.两边纤维距离越远,这种作用就越弱.相距无限远时,两纤维相互独立,其哈密顿量分别为:

$$H_L = \sum_i h_{li} ,$$

$$h_{li} = \frac{p_i^2}{2m} + u_l(\boldsymbol{x}_i);$$

$$H_R = \sum_i h_{ri} ,$$

$$h_{ri} = \frac{p_i^2}{2m} + u_r(\boldsymbol{x}_i). \tag{2}$$

单电子哈密顿量的本征态[5]分别为 $\varphi_\mu^l(\boldsymbol{x})$ 和 $\varphi_\nu^r(\boldsymbol{x})$:

$$h_l\varphi_\mu^l(\boldsymbol{x}) = \varepsilon_\mu^l\varphi_\mu^l(\boldsymbol{x}),$$

$$h_r\varphi_\nu^r(\boldsymbol{x}) = \varepsilon_\nu^r\varphi_\nu^r(\boldsymbol{x}). \tag{3}$$

μ 和 ν 表示单电子态的全部量子数,$\boldsymbol{x} = (x, y, z)$,波函数的自旋部分写成泡利列矢量[6].耦合较弱时,可望体系的单电子态与无耦合单电子态相差不

* 国家自然科学基金(批准号:50238040)资助的课题.

大,可近似地用(φ_μ^l,φ_ν^r)构成体系的 slater 波函数 $\psi_{(\mu,\nu)}$. 这里只讨论碳纤维中的电子,在其中只取(3)式的束缚态的解(φ_μ^l)与(φ_ν^r),它们不包括电离态,所以都构不成完备组.它们分别属于两个完备组,彼此并不正交:

$$\Lambda_{\mu\nu} = \langle \varphi_\mu^l \mid \varphi_\nu^r \rangle \neq 0. \tag{4}$$

因为只取束缚态,耦合较弱时这个重叠积分很小,并随着纤维间的距离增大而指数式地趋于零.

为了得到较好的近似,混合这种组态($\psi_{(\mu,\nu)}$)

$$\psi(1\cdots N) = \sum_{(\mu,\nu)} C_{(\mu,\nu)}\,\psi_{(\mu,\nu)}(1\cdots N). \tag{5}$$

叠加系数 $C_{(\mu,\nu)}$ 由哈密顿量式(1)的变分条件来确定. 在把波函数写成式(5)的近似下,不仅要求基态与各激发态的近似能量,还要求出一些其它量(如电流)的近似值.

2. 变分近似

本节的讨论具有普遍性,不限于隧道体系,所以不区分左右边态,把下标 l,r 吸收到量子数 μ 中. 函数组(φ_μ)一般并不正交归一,由它构成的 slater 函数组($\psi_{(\mu)}$)也不正交归一,求解此变分问题较难. 更方便的做法是寻找一非幺正的可逆线性变换 L,把函数组(φ_μ)变换成另一正交归一化函数组($\tilde{\varphi}_\mu$),即

$$\tilde{\varphi}_\mu(x) = \sum_\nu \varphi_\nu(x) L_{\nu\mu},$$

$$\varphi_\mu(x) = \sum_\nu \tilde{\varphi}_\nu(x) L^{-1}_{\nu\mu}, \tag{6}$$

$$\sum_\nu L_{\mu\nu} L^{-1}_{\nu\lambda} = \sum_\nu L^{-1}_{\mu\nu} L_{\nu\lambda} = \delta_{\mu\lambda}, \tag{7}$$

$$\langle \tilde{\varphi}_\mu \mid \tilde{\varphi}_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu}. \tag{8}$$

用这个正交归一化函数来构成试探波函数

$$\psi(1\cdots N) = \sum_{(\mu)} \tilde{c}_{(\mu)}\,\tilde{\varphi}_{(\mu)}(1\cdots N),$$

$$\tilde{\Psi}_{(\mu)}(1\cdots N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \tilde{\varphi}_{\mu_1}(x_1) & \cdots & \tilde{\varphi}_{\mu_1}(x_N) \\ & \cdots\cdots\cdots\cdots & \\ \tilde{\varphi}_{\mu_N}(x_1) & \cdots & \tilde{\varphi}_{\mu_N}(x_N) \end{vmatrix}. \tag{9}$$

显然

$$\langle \tilde{\Psi}_{(\mu)} \mid \tilde{\Psi}_{(\nu)} \rangle = \delta_{(\mu)(\nu)}. \tag{10}$$

于是根据变分原理可得

$$\langle \tilde{\Psi}_\mu \mid H - E \mid \psi \rangle = 0. \tag{11}$$

它是关于变分参数 $\tilde{c}_{(\mu)}$ 的齐次线性代数方程组,当表象基矢量($\tilde{\varphi}_\mu$)完备时,正是此表象中的定态薛定谔方程,当($\tilde{\varphi}_\mu$)不完备时,则是近似的薛定谔方程. 其中函数组(φ_μ)与($\tilde{\varphi}_\nu$)由一可逆线性变换相联系,它们对这里的变分问题来说是等价的. 这时由于由一可逆线性变换相联系的两个函数组表示同一子空间.

现在做两个推广. 第一,上述讨论只要求 H 是厄米的,因而不限于哈密顿量,对于任何物理量 F 都成立. 在上面把 H 换成 F,就得到相应的近似方程. 第二,考虑含时间的薛定谔方程,由变分原理可得

$$\langle \tilde{\Psi}_{(\mu)} \mid H - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} \mid \psi \rangle = 0. \tag{12}$$

一般而言,($\tilde{\Psi}_{(\mu)}$)所张的空间是一个完备空间 $\{\tilde{\Psi}_{(\mu)}\}$ 的一个子空间,运用把全空间中任一函数 $\phi(1\cdots N)$ 投影到子空间中 $\tilde{\Psi}_{(\mu)}$ 的投影算符

$$P = \sum_{(\mu)} \mid \tilde{\Psi}_{(\mu)} \rangle \langle \tilde{\Psi}_{(\mu)} \mid, \tag{13}$$

可以把近似函数(9)、本征方程(11)和薛定谔方程(12)写成

$$\psi(1\cdots N) = P\phi(1\cdots N), \tag{14}$$

$$P(H - E)P \mid \phi \rangle = 0,$$

$$P\left(H - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)p \mid \phi \rangle = 0. \tag{15}$$

与严格的方程相比较,现在的近似相当于作了如下代换:

$$H \to PHP,\ F \to PFP,$$

$$E \to EP,\ \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t} \to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}P, \tag{16}$$

于是联系薛定谔绘景与海森堡绘景的幺正变换为

$$\psi^{\mathrm{H}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}PHPt/\hbar}\psi^{\mathrm{s}},$$

$$PF^{\mathrm{H}}P = \mathrm{e}^{\mathrm{i}PHPt/\hbar}PF^{\mathrm{s}}P\mathrm{e}^{-\mathrm{i}PHPt/\hbar}. \tag{17}$$

F^{s} 是通常薛定谔绘景中的算符,$PF^{\mathrm{s}}P$ 为其在变分法近似中的形式. 但 ψ^{H} 与 F^{H} 并非通常海森堡绘景中的量,而是由上式定义的近似量. 不难看出,在此近似的海森堡绘景中,态矢量不随时间改变,$P\frac{\partial}{\partial t}\psi^{\mathrm{H}} = 0$,而力学量的运动方程为

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}(PF^{\mathrm{H}}P) = [PF^{\mathrm{H}}P, PHP]. \tag{18}$$

显然,这里变分近似相当于投影到一子空间的近似. 若($\tilde{\Psi}_{(\mu)}$)完备,则 $P = 1$,上面各式给出严格的

结果 若$(\tilde{\psi}_{(\mu)})$不完备，则 $P\neq 1$，上式给出近似的结果.但近似的好坏并不取决于 P 接近于 1 的程度，而是取决于在讨论的问题中，态矢量能否近似地用此子空间来表示.在隧道问题中，对电流有贡献的主要是束缚态，在电离态上的投影很小，可以用束缚态构成的子空间来近似.

最后，把上述结果写成二次量子化形式.由于$(\tilde{\varphi}_\mu)$不一定完备，因而不能直接运用通常量子力学的公式.下面用 P 算符方法来做.假设$(\tilde{\varphi}_\mu)$是某一完备组 $\{\tilde{\varphi}_\mu\}$的一部分，对此完备组可以运用通常的二次量子化公式.把 $\tilde{\varphi}_\mu$ 态上的湮没、产生算符记为 C_μ, C_μ^+，它满足费米子反易规则

$$\{C_\mu, C_\nu\} = \{C_\mu^+, C_\nu^+\} = 0,$$
$$\{C_\mu, C_\nu^+\} = \delta_{\mu\nu}, \tag{19}$$

则波函数 $\tilde{\psi}_{(\mu)}(1\cdots N)$、单体力学量 F_1、两体力学量 F_2 和投影算符 P_N 的二次量子化表示分别为

$$\tilde{\psi}_{(\mu)}(1\cdots N) = C_{\mu_1}^+\cdots C_{\mu_N}^+\rangle, \tag{20}$$

$$F_1 = \sum_i f_1(i) = \sum_{\nu\, all}\sum_{\lambda\, all} C_\nu^+\langle\tilde{\varphi}_\nu \mid f_1 \mid \tilde{\varphi}_\lambda\rangle C_\lambda, \tag{21}$$

$$F_2 = \sum\sum_{i\neq j} f_2(i,j) = \sum_{\mu\, all}\sum_{\nu\, all}\sum_{\lambda\, all}\sum_{\rho\, all} C_\mu^+ C_\nu^+\langle\tilde{\varphi}_\mu\tilde{\varphi}_\nu \mid f_2 \mid \tilde{\varphi}_\lambda\tilde{\varphi}_\rho\rangle C_\lambda C_\rho, \tag{22}$$

$$P_N = \sum_{(\mu)} \mid C_{\mu_1}^+\cdots C_{\mu_N}^+\rangle\langle C_{\mu_N}\cdots C_{\mu_1}\mid, \tag{23}$$

其中$\sum_{\mu\, all}$ 表示求和遍及完备组 $\{\tilde{\varphi}_\mu\}$的全部量子数，$\sum_\mu$ 表示只遍及函数组$(\tilde{\varphi}_\mu)$的量子数，$\sum_{(\mu)}$表示对试探函数所取的各种组合(μ)求和.把(21)至(23)式代入(16)式中，即得变分法近似中力学量的二次量子化形式

$$PF_1P = \sum_\nu\sum_\lambda C_\nu^+\langle\tilde{\varphi}_\nu \mid f_1 \mid \tilde{\varphi}_\lambda\rangle C_\lambda \cdot P, \tag{24}$$

$$PF_2P = \sum_\mu\sum_\nu\sum_\lambda\sum_\rho C_\mu^+C_\nu^+ \times\langle\tilde{\varphi}_\mu\tilde{\varphi}_\nu \mid f_2 \mid \tilde{\varphi}_\lambda\tilde{\varphi}_\rho\rangle C_\lambda C_\rho \cdot P. \tag{25}$$

它们是作用于完备空间的矢量上的算符，右边的 P 算符向右乘于 $\phi(1\cdots N)$，得到子空间中的矢量 $\psi(1\cdots N)$.所以若只限于此子空间的运算，则上两式右方的 P 可以省去.与严格的(21)，(22)式相比，上两式中的求和只遍及子空间$(\tilde{\varphi}_\mu)$的量子数集合(μ).这两式还可以改写成

$$\int \mathrm{d}x\tilde{\varphi}^+(x)f_1(x)\tilde{\varphi}(x),$$
$$\iint \mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2\tilde{\varphi}^+(x_1)\tilde{\varphi}^+(x_2)f_2(x_1,x_2)\tilde{\varphi}(x_2)\tilde{\varphi}(x_1) \tag{26}$$

其中已经省去了 P，而

$$\tilde{\varphi}(x) = \sum_\mu C_\mu\tilde{\varphi}_\mu(x),$$
$$\tilde{\varphi}^+(x) = \sum_\mu C_\mu^+\tilde{\varphi}_\mu^+(x). \tag{27}$$

虽然在上述做法中引入了完备组 $\{\tilde{\varphi}_\mu\}$和相应的算符 $\{C_\mu, C_\mu^+\}$，但在最后的结果中仍然只保留函数组$(\tilde{\varphi}_\mu)$和相应的 $\{C_\mu, C_\mu^+\}$，所以运用时只需要知道函数组$(\tilde{\varphi}_\mu)$即可.

3. 近似哈密顿量与隧道电流

对于已知函数组(φ_μ)，如何选择 L，须根据具体问题的物理要求而定.对于隧道体系，$(\varphi_\mu) = (\varphi_\mu^l, \varphi_\nu^r)$，在弱耦合条件下 $\Lambda_{\mu\nu}$ 是小量，可期望正交归一化以后的态$(\tilde{\varphi}_\mu^l, \tilde{\varphi}_\nu^r)$与原来的态差别不大.研究发现 Löwdin 变换[7] 能满足此要求.Löwdin 变换是厄米的：

$$L^+ = L, (L^{-1})^+ = L^{-1}, \tag{28}$$

于是写成矩阵形式，即有

$$\varphi(x) = (\varphi_{\mu_1}, \cdots, \varphi_{\mu_N}),$$
$$\tilde{\varphi}(x) = (\tilde{\varphi}_{\mu_1}, \cdots, \tilde{\varphi}_{\mu_N}), \tag{29}$$

$$s = \varphi^+\varphi = (\tilde{\varphi}L^{-1})^+(\tilde{\varphi}L^{-1}) = (L^{-1})^+L^{-1} = L^{-2}, \tag{30}$$

$$s = (s_{\mu\mu'}), s_{\mu\mu'} = \langle\varphi_\mu \mid \varphi_{\mu'}\rangle. \tag{31}$$

从(30)式可以解出 $L = s^{-1/2}, L^{-1} = s^{1/2}$，当 s 与 1 相差很小时，可以写成 $s = 1 + \Lambda$，而把 L 和 L^{-1} 展开成 Λ 的幂级数：

$$L = 1 - \frac{1}{2}\Lambda + \frac{3}{8}\Lambda^2 - \frac{5}{16}\Lambda^3 + \cdots$$
$$L^{-1} = 1 + \frac{1}{2}\Lambda - \frac{1}{8}\Lambda^2 + \frac{1}{16}\Lambda^3 - \cdots \tag{32}$$

代入(6)式，即得 Löwdin 函数：

$$\tilde{\varphi}_\mu = \varphi_\mu - \frac{1}{2}\sum_{\mu'}\varphi_{\mu'}\Lambda_{\mu'\mu} + \frac{3}{8}\sum_{\mu'}\sum_{\mu''}\varphi_{\mu'}\Lambda_{\mu'\mu''}\Lambda_{\mu''\mu'} - \cdots$$
$$\varphi_\mu = \tilde{\varphi}_\mu + \frac{1}{2}\sum_{\mu'}\tilde{\varphi}_{\mu'}\Lambda_{\mu'\mu} - \frac{1}{8}\sum_{\mu'}\sum_{\mu''}\varphi_{\mu'}\Lambda_{\mu'\mu''}\Lambda_{\mu''\mu'} + \cdots \tag{33}$$

用于隧道体系,写明区分左右的角标,即得下列 Löwdin 函数:

$$\tilde{\varphi}^{\mathrm{l}}_{\mu} = \mu^{\mathrm{l}}_{\mu} - \frac{1}{2}\sum_{\nu}\varphi^{\mathrm{r}}_{\nu}\Lambda_{\nu\mu} + \frac{3}{8}\sum_{\mu'}\sum_{\mathrm{l}\nu}\varphi^{\mathrm{l}}_{\mu'}\Lambda_{\mu'\nu}\Lambda_{\nu\mu} - \cdots$$
$$\tilde{\varphi}^{\mathrm{r}}_{\nu} = \mu^{\mathrm{r}}_{\nu} - \frac{1}{2}\sum_{\mu}\varphi^{\mathrm{l}}_{\mu}\Lambda_{\mu\nu} + \frac{3}{8}\sum_{\nu'}\sum_{\mu}\varphi^{\mathrm{r}}_{\nu'}\Lambda_{\nu'\mu}\Lambda_{\mu\nu} - \cdots \tag{34}$$

在弱耦合时 $\Lambda_{\mu\nu}$ 是小量,以后只保留一次项.于是,态 $\tilde{\varphi}^{\mathrm{l}}_{\mu}$ 中混入少量态 $\varphi^{\mathrm{r}}_{\nu}$,与 $\varphi^{\mathrm{l}}\mu$ 差别不大,可称为隧道体系的左边态,相仿地称 $\tilde{\varphi}^{\mathrm{r}}_{\nu}$ 为右边态.

把(34),(1)两式代入(24)或(26)式,再由(3)式,即有

$$\langle\tilde{\varphi}^{\mathrm{l}}_{\mu} | h | \tilde{\varphi}^{\mathrm{l}}_{\mu'}\rangle \approx \langle\tilde{\varphi}^{\mathrm{l}}_{\mu} | h | \tilde{\varphi}^{\mathrm{l}}_{\mu'}\rangle \approx \mathscr{E}^{\mathrm{l}}_{\mu}\delta_{\mu\mu'},$$
$$\langle\tilde{\varphi}^{\mathrm{r}}_{\nu} | h | \tilde{\varphi}^{\mathrm{r}}_{\nu'}\rangle \approx \langle\tilde{\varphi}^{\mathrm{r}}_{\nu} | h | \tilde{\varphi}^{\mathrm{r}}_{\nu'}\rangle \approx \mathscr{E}^{\mathrm{r}}_{\nu}\delta_{\nu\nu'}, \tag{35}$$

其中的计算只准确到 $\Lambda_{\mu\nu}$ 的一级.于是有

$$H = H^{n}_{\mathrm{L}} + H^{n}_{\mathrm{R}} + H_{T} \tag{36}$$

$$H^{n}_{\mathrm{L}} = \sum_{\mu}\mathscr{E}^{\mathrm{l}}_{\mu}C^{\mathrm{l}^{+}}_{\mu}C^{\mathrm{l}}_{\mu},\quad H^{n}_{\mathrm{R}} = \sum_{\nu}\mathscr{E}^{\mathrm{r}}_{\nu}C^{\mathrm{r}^{+}}_{\nu}C^{\mathrm{r}}_{\nu} \tag{37}$$

$$H_{T} = \sum_{\mu}\sum_{\nu}(T_{\mu\nu}C^{\mathrm{l}^{+}}_{\mu}C^{\mathrm{r}}_{\nu} + T^{*}_{\mu\nu}C^{\mathrm{r}^{+}}_{\nu}C^{\mathrm{l}}_{\mu}) \tag{38}$$

$$T_{\mu\nu} = \langle\tilde{\varphi}^{\mathrm{l}}_{\mu} | h | \tilde{\varphi}^{\mathrm{r}}_{\nu}\rangle,\quad T^{*}_{\mu\nu} = \langle\tilde{\varphi}^{\mathrm{r}}_{\nu} | h | \tilde{\varphi}^{\mathrm{l}}_{\mu}\rangle \tag{39}$$

算符的对易关系由(19)式给出,写明区分左、右的角标,有

$$\{C^{\mathrm{l}}_{\mu}, C^{\mathrm{l}}_{\mu'}\} = \{C^{\mathrm{r}}_{\nu}, C^{\mathrm{r}}_{\nu'}\} = \{C^{\mathrm{l}}_{\mu}, C^{\mathrm{r}}_{\nu}\} = \{C^{\mathrm{l}}_{\mu}, C^{\mathrm{r}^{+}}_{\nu}\} = 0$$
$$\{C^{\mathrm{l}}_{\mu}, C^{\mathrm{l}^{+}}_{\mu'}\} = \delta_{\mu\mu'},\quad \{C^{\mathrm{r}}_{\nu}, C^{\mathrm{r}^{+}}_{\nu'}\} = \delta_{\nu\nu'} \tag{40}$$

(39)式可以看作 $T_{\mu\nu}$ 的定义,同样只准确到 $\Lambda_{\mu\nu}$ 的一级,有

$$T_{\mu\nu} = \langle\varphi^{\mathrm{l}}_{\mu} | h - \frac{1}{2}(h_{\mathrm{l}} + h_{\mathrm{r}}) | \varphi^{\mathrm{r}}_{\nu}\rangle$$
$$= \langle\varphi^{\mathrm{l}}_{\mu} | \frac{1}{2}(\upsilon_{\mathrm{l}} + \upsilon_{\mathrm{r}}) | \varphi^{\mathrm{r}}_{\nu}\rangle \tag{41}$$

由此可以看出 $T_{\mu\nu}$ 与 $\Lambda_{\mu\nu}$ 同数量级.利用(41)式还可进一步推出以下公式:

$$T_{\mu\nu} = -\mathrm{i}\hbar j_{\mu\nu}(x_1) - (\mathscr{E}^{\mathrm{l}}_{\mu} - \mathscr{E}^{\mathrm{r}}_{\nu})\lambda_{\mu\nu}(x_1) \tag{42}$$

$$j_{\mu\nu}(x_1) = \int\mathrm{d}y\int\mathrm{d}z\,\frac{-\mathrm{i}\hbar}{2m}\Big\{\varphi^{\mathrm{l}^{+}}_{\mu}(x_1,y,z)\frac{\partial}{\partial x_1}\varphi^{\mathrm{r}}_{\nu}(x_1,y,z) - \Big[\frac{\partial}{\partial x_1}\varphi^{\mathrm{l}^{+}}_{\mu}(x_1,y,z)\Big]\varphi^{\mathrm{r}}_{\nu}(x_1,y,z)\Big\} \tag{43}$$

$$\lambda_{\mu\nu}(x_1) = \int\mathrm{d}y\int\mathrm{d}z\Big\{\frac{1}{2}\int_{x_1}^{\infty}\mathrm{d}x\varphi^{\mathrm{l}^{+}}_{\mu}(\boldsymbol{x})\varphi^{\mathrm{r}}_{\nu}(\boldsymbol{x}) - \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{x_1}\mathrm{d}x\varphi^{\mathrm{l}^{+}}_{\mu}(\boldsymbol{x})\varphi^{\mathrm{r}}_{\nu}(\boldsymbol{x})\Big\} \tag{44}$$

x_1 是势垒中的任意一点.式(42)也准确到 $\Lambda_{\mu\nu}$ 的一级.当 $\mathscr{E}^{\mathrm{l}}_{\mu} = \mathscr{E}^{\mathrm{r}}_{\nu}$ 时,由式(42)立即可得

$$T_{\mu\nu} = -\mathrm{i}\hbar j_{\mu\nu}(x_1) \tag{45}$$

为了解释式(36)的物理含意,还要求出在变分近似下右边粒子数算符 $\bar{N}_{\mathrm{R}}$ 的二次量子化形式.根据下述定义:

$$\bar{N}_{\mathrm{R}} = \int_{x_1}^{\infty}\mathrm{d}x\int\mathrm{d}y\int\mathrm{d}z\tilde{\varphi}^{+}(\boldsymbol{x})\tilde{\varphi}(\boldsymbol{x}) \tag{46}$$

不难算出准确到 $\Lambda_{\mu\nu}$ 一级的公式

$$\bar{N}_{\mathrm{R}} = N_{\mathrm{R}} + n_{\mathrm{L}} - n_{\mathrm{R}} + n_{T} \tag{47}$$

$$N_{\mathrm{R}} = \sum_{\nu}C^{\mathrm{r}^{+}}_{\nu}C^{\mathrm{r}}_{\nu}$$
$$n_{\mathrm{L}} = \sum_{\mu}\sum_{\mu'}\gamma^{\mathrm{l}}_{\mu\mu'}(x_1)C^{\mathrm{l}^{+}}_{\mu}C^{\mathrm{l}}_{\mu}$$
$$n_{\mathrm{R}} = \sum_{\nu}\sum_{\nu'}\gamma^{\mathrm{r}}_{\nu\nu'}(x_1)C^{\mathrm{r}^{+}}_{\nu}C^{\mathrm{r}}_{\nu} \tag{48}$$
$$n_{\mathrm{r}} = \sum_{\mu}\sum_{\nu}[\lambda_{\mu\nu}(x_1)C^{\mathrm{l}^{+}}_{\mu}C^{\mathrm{r}}_{\nu} + \lambda^{*}_{\mu\nu}(x_1)C^{\mathrm{r}^{+}}_{\nu}C^{\mathrm{l}}_{\mu}]$$

$$\gamma^{\mathrm{l}}_{\mu\mu'}(x_1) = \int_{x_1}^{\infty}\mathrm{d}x\int\mathrm{d}y\int\mathrm{d}z\varphi^{\mathrm{l}^{+}}_{\mu}(\boldsymbol{x})\varphi^{\mathrm{l}}_{\mu'}(\boldsymbol{x})$$
$$\gamma^{\mathrm{r}}_{\nu\nu'}(x_1) = \int_{-\infty}^{x_1}\mathrm{d}x\int\mathrm{d}y\int\mathrm{d}z\varphi^{\mathrm{r}^{+}}_{\nu}(\boldsymbol{x})\varphi^{\mathrm{r}}_{\nu'}(\boldsymbol{x}) \tag{49}$$

积分 $\lambda_{\mu\nu}(x_1)$,$\gamma^{\mathrm{l}}_{\mu\mu'}(x_1)$,$\gamma^{\mathrm{r}}_{\nu\nu'}(x_1)$ 都是与 $\Lambda_{\mu\nu}$ 同数量级的.$\bar{N}_{\mathrm{R}}$ 是右边态上的粒子数算符.如果略去 $\Lambda_{\mu\nu}$ 的一次项,则有 $\bar{N}_{\mathrm{R}} = N_{\mathrm{R}}$.这表明在零级近似下右边的粒子数等于右边态($\tilde{\varphi}_{\nu}$)上的粒子总数.对于隧道电流的统计平均值,我们还用 Green 函数方法证明了 $\bar{N}_{\mathrm{R}}$ 与 $\bar{N}_{\mathrm{R}}$ 准确到 $\Lambda_{\mu\nu}$ 的一级是等价的.这表明虽然在 Löwdin 函数 $\tilde{\varphi}^{\mathrm{r}}_{\nu}$ 中混有少量左边碳纤维的单电子态 $\varphi^{\mathrm{l}}_{\mu}$,还是可以合理地把它称为右边态.同样,可以合理地把 $\tilde{\varphi}^{\mathrm{l}}_{\mu}$ 称为左边态.此外,从式(40)可以看出左边态与右边态是相互独立的.可以进一步证明 $[H^{n}_{\mathrm{L}}, H^{n}_{\mathrm{R}}] = 0$.因此对于式(36)可作如下物理解释:$H_T$ 被视为微扰,则左边态($\tilde{\varphi}^{\mathrm{l}}_{\mu}$)和右边态($\tilde{\varphi}^{\mathrm{r}}_{\nu}$)描述两个互相独立的体系,在零级近似下它们等于无耦合的两碳纤维各自的单电子束缚态,而 H_T 引起它们的跃迁,使电子从一纤维跃迁到另一纤维,隧道电流 j_x 正比于右边态上的粒子数的变化率 N_R.把式(36),(48)代入近似的海森堡运动方程(18),即得多粒子体系的隧道电流

$$j_x = e\dot{N}_{\mathrm{R}} = \frac{e}{\mathrm{i}\hbar}[N_{\mathrm{R}}, N]$$

$$= -\frac{e}{\mathrm{i}\hbar}\sum_{\mu}\sum_{\nu}\left[T_{\mu\nu}C_{\mu}^{\mathrm{l}^{+}}C_{\nu}^{\mathrm{r}} - T_{\mu\nu}^{*}C_{\nu}^{\mathrm{r}^{+}}C_{\mu}^{\mathrm{l}}\right] \quad (50)$$

4. 讨 论

这里提出了一个运用变分法处理量子力学多粒子体系的方案,这个方案可以很自然地分析隧道效应电流,在目前用来讨论隧穿问题的量子场论方法——瞬子法[8]之外,提供了另一种选择.事实上,从微观理论而言,该方案也能处理纤维间砂浆对隧道电流的影响,以及外场效应与隧道电流的关系.处理中的关键问题在于:选择的试探波函数的基底(φ_{μ})必须是线性无关组;Löwdin 级数(32)必须是收敛的.

应该指出,前面有关隧道电流的分析没有考虑纤维的外形的影响.这是基于如下事实:在碳纤维混凝土中,碳纤维的直径比纤维间产生隧道电流的有效距离(2.5nm 左右)高出 2—3 个数量级,完全可以把纤维的表面作平面处理.

[1] Sichel E K *et al* 1978 *Phys*. *Rev*. **18** 5712

[2] Sichel E K 1976 *The Physics of Electrically Conducting Composite* (New York:Marcel Dekker) p70

[3] Giaever I and Megerle K 1981 *Phys*. *Rev*. **122** 1101

[4] Wangh F R *et al* 1995 *Phys*. *Rev*. **75** 4702

[5] Gurvitz S A *et al* 1999 *Phys*. *Lett*. **8** 1377

[6] Gao X C *et al* 1991 *Phys*. *Rev*. **44** 7016

[7] Yang Q 1989 *Quantum Statistics* (Beijing:Science Press) p135 [杨 1989 量子统计学(北京:科学出版社)第 135 页]

[8] Liu W M *et al* 2002 *Phys*. *Rev*. **88** 170408

Tunnel current in carbon fiber reinforced concrete*

Luo Lai-Long

(*College of Science*, *Wuhan University of Technology*, *Wuhan* 430063, *China*)

(Received 11 October 2004)

Abstract

For tunnel systems in carbon fiber-reinforced concrete, the train of thoughts of approximate calculation using the variational method is precented. And approximate Hamitonian quantity of the tunnel system by Löwdin transform is obtained. Then the tunnel current through the potential barrier is deduced.

Keywords: variational method, carbon fiber, tunnel effect, concrete

PACC: 0365G, 7340G, 1420C

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50238040).