

B. C. S. 超导基态渐近正确性的证明*

陶云 孙鑫 周世勋

(复旦大学)

许多工作讨论了 B. C. S. 超导基态的渐近准确性。在文献[1]中指出, B. C. S. 哈密顿量经 uv 变换后, 剩余相互作用的贡献每一项都有限, 而且反比于体积 Q 的 n 次方 ($n \geq 0$), 但是此工作没有证明这些渐近小项之和收敛。文献[2]利用微扰方法证明了剩余相互作用的主要贡献(与 Q^0 成正比的梯形图)是收敛的, 但未能对非梯形图(反比于 Q^n , $n > 0$)求和。文献[3]利用格林函数证明了三体和四体关联正比于 Q^0 , 然而没有证明任意体关联都正比于 Q^0 。所以迄今还未能严格地证明 B. C. S. 基态是渐近正确的。本文利用文献[4]中建立的判别多体微扰级数收敛性的方法, 可以证明: 如果将 B. C. S. 哈密顿量经 uv 变换后的剩余相互作用作为微扰, 其 Schrödinger 微扰级数是收敛的, 从而严格证明了 B. C. S. 超导基态是渐近正确的。

超导体系的 B. C. S. 模型哈密顿量是

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} T_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\sigma} - \frac{1}{Q} \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{-\mathbf{k}\uparrow}, \quad (1)$$

求和号上一撇表示 $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$; $J_{\mathbf{k}}, J_{\mathbf{k}'}$ 是可分离的相互作用常数, 限制在 Fermi 表面附近 ($E_F - \hbar\omega \rightarrow E_F + \hbar\omega$) 一层内。因为 $\hat{H}$ 中 $a_{\mathbf{k}\uparrow}$ 和 $a_{-\mathbf{k}\downarrow}$ 配对出现, 所以配对波函数组成的函数空间对此哈密顿算符将是完备的。

利用 uv 变换,

$$a_{\mathbf{k}\uparrow} = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}\uparrow} + v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger}; \quad a_{\mathbf{k}\downarrow} = u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}\downarrow} - v_{\mathbf{k}} \alpha_{-\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger}, \quad (2)$$

$$u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1, \quad (3)$$

可从 a 表象变换到 α 表象中去, (2) 相当于么正变换

$$\alpha_{\mathbf{k}\sigma} = e^{i\hat{S}} a_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\hat{S}}; \quad \hat{S} = i \sum_{\mathbf{k}} \theta_{\mathbf{k}} (a_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} a_{-\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} - a_{-\mathbf{k}\downarrow} a_{\mathbf{k}\uparrow}). \quad (4)$$

此变换也是配对的, 所以在 α 表象中, 配对的函数空间仍旧是完备的。变换后的哈密顿量是

$$\hat{H}_\alpha = U + \hat{H}^0 + \hat{H}' + \hat{H}', \quad (5)$$

$$U = 2 \sum_{\mathbf{k}} T_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 - \frac{1}{Q} \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}, \quad (6)$$

$$\hat{H}^0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \left[T_{\mathbf{k}} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2) + \frac{2}{Q} \sum'_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'} \right] \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (7)$$

$$\hat{H}' = \hat{H}'_1 + \hat{H}'_2 + \hat{H}'_3 + \hat{H}'_4, \quad (8)$$

$$\hat{H}'_1 = -\frac{1}{Q} \sum'_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}'} (u_{\mathbf{k}}^2 u_{\mathbf{k}'}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2) \alpha_{\mathbf{k}\uparrow}^{\dagger} \alpha_{\mathbf{k}\downarrow}^{\dagger} \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow} \alpha_{-\mathbf{k}\uparrow}, \quad (9)$$

* 1964年6月5日收到。

$$\hat{H}'_2 = \frac{1}{2Q} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}'} (u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}'}^2 + u_{\mathbf{k}'}^2 v_{\mathbf{k}}^2) \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{-\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}'}^+ \alpha_{-\mathbf{k}'}^+ + \text{C.C.}, \quad (10)$$

$$\hat{H}'_3 = \frac{1}{Q} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma} J_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}'}^2) \alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{-\mathbf{k}}^+ \alpha_{\mathbf{k}'\sigma}^+ \alpha_{-\mathbf{k}'\sigma} + \text{C.C.}, \quad (11)$$

$$\hat{H}'_4 = -\frac{1}{Q} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} J_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}^+ \alpha_{\mathbf{k}'\sigma'}^+ \alpha_{\mathbf{k}'\sigma} \alpha_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (12)$$

$$\hat{H}' = \sum_{\mathbf{k}} \left[2T_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \frac{1}{Q} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}'}^2) \right] (\alpha_{\mathbf{k}}^+ \alpha_{-\mathbf{k}}^+ + \alpha_{-\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}), \quad (13)$$

$u_{\mathbf{k}}, v_{\mathbf{k}}$ 由 $\hat{H}' = 0$ 的条件确定, 即

$$2T_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} - \frac{1}{Q} \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}'} (u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}'}^2) = 0. \quad (14)$$

由(14)和(3)可解得

$$\left. \begin{aligned} u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{T_{\mathbf{k}}}{\sqrt{C_{\mathbf{k}}^2 + T_{\mathbf{k}}^2}} \right); \quad v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{T_{\mathbf{k}}}{\sqrt{C_{\mathbf{k}}^2 + T_{\mathbf{k}}^2}} \right); \\ u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} &= -\frac{1}{2} \frac{C_{\mathbf{k}}}{\sqrt{C_{\mathbf{k}}^2 + T_{\mathbf{k}}^2}}. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

能隙 $C_{\mathbf{k}}$ 由下列方程确定:

$$\frac{1}{2Q} \sum_{\mathbf{k}} \frac{J_{\mathbf{k}}^2}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} = 1; \quad \varepsilon_{\mathbf{k}} = \sqrt{C_{\mathbf{k}}^2 + T_{\mathbf{k}}^2}. \quad (16)$$

无相互作用的基态能量是 U , 它正比于体积 Q :

$$U = -\frac{Q}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - T_{\mathbf{k}})^2}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (17)$$

将 α 粒子的相互作用 $\hat{H}'$ 看作微扰. 在弱耦合情况下, $C_{\mathbf{k}} \ll \hbar\omega$, 因为 $\hat{H}'_3, \hat{H}'_4$ 中含有 $u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}$, 所以相互作用 $\hat{H}'_3$ 和 $\hat{H}'_4$ 比 $\hat{H}'_1$ 和 $\hat{H}'_2$ 弱, 因而总的说来, α 粒子的剩余相互作用仍是吸引的. 文献[1], [2]中已指出, 由 $\hat{H}'$ 组成的微扰图形每一项都有限且正比于 $Q^{-n} (n \geq 0)$. 本文将证明所有微扰图形之和是收敛的.

文献[4]证明了 Schrödinger 微扰级数收敛的充要条件是 Wigner 微扰级数收敛, 要判别 Wigner 微扰级数的收敛性, 可考察本征值方程

$$\frac{\hat{P}}{E - \hat{H}^0 - U} \hat{H}' |\phi\rangle = \chi(E) |\phi\rangle, \quad (18)$$

式中 E 是参数, $\hat{P}$ 是排除 $\hat{H}^0$ 基态 (α 粒子真空态) 的投影算符. 微扰级数在基态能量 E_0 处收敛的条件是

$$\chi_{\max}(E_0) < 1 - \delta \quad (\delta > 0). \quad (19)$$

因为

$$\chi(E) = \frac{\langle \phi | \hat{H}' \frac{\hat{P}}{E - U - \hat{H}^0} \hat{H}' | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{H}' | \phi \rangle}, \quad (20)$$

所以

$$\chi_{\max}(E) \leq \sup_{|f\rangle \in \mathcal{H}^\perp} \frac{\langle f | \hat{H}' \frac{\hat{P}}{E - U - \hat{H}^0} \hat{H}' | f \rangle}{\langle f | \hat{H}' | f \rangle}, \quad (21)$$

$\mathcal{H}^\perp$ 是經 $\hat{P}$ 投影后的函数空間, Sup 表示取上确界.

如果在 $\hat{H}'$ 中只包括 $\hat{H}'_1 + \hat{H}'_2$, 則組成的微扰图形是梯形图^[2]. Thouless 指出梯形图的收敛条件是^[5]

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{g_{\mathbf{k}\mathbf{k}}}{2\varepsilon_{\mathbf{k}}} \text{th} \frac{1}{2} \beta \varepsilon_{\mathbf{k}} < 1.$$

在零度下上式变为

$$\frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \frac{g_{\mathbf{k}\mathbf{k}}}{\varepsilon_{\mathbf{k}}} < 1, \quad (22)$$

式中 $g_{\mathbf{k}\mathbf{k}}$ 是相互作用常数, 在現在情况下, 对于 $\hat{H}'_1$,

$$g_{\mathbf{k}\mathbf{k}} = J_{\mathbf{k}}^2 (u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2) < J_{\mathbf{k}}^2, \quad (23)$$

对于 $\hat{H}'_2$,

$$g_{\mathbf{k}\mathbf{k}} = J_{\mathbf{k}}^2 u_{\mathbf{k}}^2 v_{\mathbf{k}}^2 < J_{\mathbf{k}}^2. \quad (24)$$

將(23), (24)代入(16)可知, 收敛条件(22)是滿足的. 所以在 α 表象中, 梯形图之和是收敛的, 因而本征值方程

$$\frac{\hat{P}}{E - U - \hat{H}^0} (\hat{H}'_1 + \hat{H}'_2) |\xi\rangle = \eta(E) |\xi\rangle \quad (25)$$

中的本征值滿足

$$\eta_{\max}(E_0) < 1 - \delta. \quad (26)$$

注意到

$$\begin{aligned} \hat{H}'_1 + \hat{H}'_2 = & -\frac{1}{\Omega} \left(\sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}}^2 \alpha_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ - \sum_{\mathbf{k}} J_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 \alpha_{-\mathbf{k}\downarrow}^+ \alpha_{\mathbf{k}\uparrow}^+ \right) \times \\ & \times \left(\sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}'}^2 \alpha_{-\mathbf{k}'\downarrow} \alpha_{\mathbf{k}'\uparrow} - \sum_{\mathbf{k}'} J_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}^2 \alpha_{\mathbf{k}'\uparrow}^+ \alpha_{-\mathbf{k}'\downarrow}^+ \right) \equiv -\frac{1}{\Omega} A^+ A, \end{aligned}$$

所以根据文献[4]中的証明有

$$\eta_{\max}(E_0) = \sup_{|f\rangle \in \mathcal{H}^\perp} \frac{\langle f | (\hat{H}'_1 + \hat{H}'_2) \frac{\hat{P}}{E_0 - U - H^0} (\hat{H}'_1 + \hat{H}'_2) | f \rangle}{\langle f | \hat{H}'_1 + \hat{H}'_2 | f \rangle} < 1 - \delta. \quad (27)$$

前面已經指出, $\hat{H}_a$ 的函数空間是由配对波函数組成的, 因此 $\mathcal{H}^\perp$ 中的波函数 $|f\rangle$ 的一般形式是

$$\left. \begin{aligned} |f\rangle &= \sum_{\beta \geq 1} C_{\beta} |\phi_{\beta}\rangle, \\ |\phi_{\beta}\rangle &= \Omega^{-\beta/2} \sum_{\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{\beta}} g(\mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{\beta}) \alpha_{\mathbf{k}_1\uparrow}^+ \alpha_{-\mathbf{k}_1\downarrow}^+ \cdots \alpha_{\mathbf{k}_{\beta}\uparrow}^+ \alpha_{-\mathbf{k}_{\beta}\downarrow}^+ |0\rangle, \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

式中 $\Omega^{-\beta/2}$ 是归一化体积因子, C_{β} 和 g 中不含 Ω . 利用(28)不难知道:

$$\left. \begin{aligned} \langle \phi_{\beta} | \hat{H}'_1 | \phi_{\beta} \rangle &\sim \Omega^0, \\ \langle \phi_{\beta} | \hat{H}'_2 | \phi_{\beta-2} \rangle &\sim \langle \phi_{\beta-2} | \hat{H}'_2 | \phi_{\beta} \rangle \sim \Omega^0, \\ \langle \phi_{\beta} | \hat{H}'_3 | \phi_{\beta-1} \rangle &\sim \langle \phi_{\beta-1} | \hat{H}'_3 | \phi_{\beta} \rangle \sim \Omega^{-1/2}, \\ \langle \phi_{\beta} | \hat{H}'_4 | \phi_{\beta} \rangle &\sim \Omega^{-1}. \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

所以

$$\frac{\langle f | \hat{H}^I | f \rangle}{\langle f | \hat{H}_1^I + \hat{H}_2^I | f \rangle} = 1 + o(\Omega^{-1/2}). \quad (30)$$

同样可求得

$$\frac{\langle f | \hat{H}^I \frac{\hat{P}}{E - U - H^0} \hat{H}^I | f \rangle}{\langle f | (\hat{H}_1^I + \hat{H}_2^I) \frac{\hat{P}}{E - U - H^0} (\hat{H}_1^I + \hat{H}_2^I) | f \rangle} = 1 + o(\Omega^{-1/2}). \quad (31)$$

将(30), (31)代入(21)可得

$$\chi_{\max}(E_0) \leq \sup_{|n \in \mathcal{D}^\perp} \frac{\langle f | (\hat{H}_1^I + \hat{H}_2^I) \frac{\hat{P}}{E_0 - U - H^0} (\hat{H}_1^I + \hat{H}_2^I) | f \rangle}{\langle f | \hat{H}_1^I + \hat{H}_2^I | f \rangle} + o(\Omega^{-1/2}). \quad (32)$$

利用(27)式可得

$$\lim_{\Omega \rightarrow \infty} \chi_{\max}(E_0) < 1 - \delta. \quad (33)$$

从(33)式可知, 由 $\hat{H}^I$ 所组成的微扰级数是收敛的. 因为每一微扰项都正比于 Ω^{-n} ($n \geq 0$), 所以 α 粒子的相互作用对单位体积基态能量的贡献是渐近趋于零的(当 $\Omega \rightarrow \infty$ 时), 因而由(17)式给出的超导基态能量 U 是渐近准确的.

参 考 文 献

- [1] Боголюбов, Н. Н., ЖЭТФ, **39** (1960), 120.
- [2] 孙鑫、陶云, 复旦大学学报, **9**, p.539.
- [3] Klein, A., *Nuovo Cimento*, **24** (1962), 788.
- [4] 陶云、周世勋, 吸引费米体系的束缚态与多体微扰级数的收敛性(尚未发表).
- [5] Thouless, D., *Ann. Phys.*, **10** (1960), 553.