

用变分法讨论超导体隧道体系的近似哈密顿量*

王 正 行

(北京大学技术物理系)

提 要

我们推广了 Боголюбов 等人的变分近似方法用来处理超导体隧道体系问题,发现 Cohen 等人假设的模拟哈密顿量在变分法近似下到一级是成立的. Prange 对这个问题的处理是不恰当的.

一、引 言

CFP^[1] 模拟哈密顿量 $H = H_L + H_R + H_T$ 是处理超导体隧道体系问题的出发点. H_L, H_R 分别为左、右边金属的完整哈密顿量, H_T 为引起电子迁移的微扰,

$$H_T = \sum_k \sum_{k'} \sum_{\sigma} (T_{kk'} c_{k\sigma}^{l\top} c_{k'\sigma}^r + T_{kk'}^* c_{k'\sigma}^{r\top} c_{k\sigma}^l), \quad (1)$$

式中角标 l, r 区分左和右, $T_{kk'}$ 假设取 Bardeen 公式^[2]的形式. 对此模拟哈密顿量的微观理论基础,有过一些探讨^[3-6], 常被提到的^[7]主要是 Prange^[4]的工作. 不过王竹溪教授指出(见附录), 由于 Prange 对同一希耳伯空间同时使用两组完备的基矢, 因而引入任意性, 所以他的整个做法并不恰当. 为了避开这种任意性, 本工作采用变分法近似, 结果表明 CFP 模拟哈密顿量在一级近似下成立.

由于绝缘层的性质并不明显地影响隧道电流, 若略去其结构, 把它当成真空, 就可把超导体隧道体系看成两个大分子的耦合体系. 考虑两块金属相距不很近, 耦合较弱的情况, 这时耦合的效果除使电子在两块金属间以一很小的几率跃迁外, 不致于引起其它性质(如各块金属的电子态密度、超导能隙和转变温度等)的明显改变. Giaever^[8] 半唯象理论的成功, 支持了这个物理图象. 因此, 以各种可能的无耦合态的线性迭加作为变分试探波函数, 可望得到较好的近似. 这相当于分子和固体理论中推广了的 Heitler-London 近似.

在隧道电流问题中, 主要关心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, 就可把体系的哈密顿量写成单电子哈密顿量之和:

$$H = \sum_i h_i, \quad h_i = \frac{P_i^2}{2m} + v_l(\mathbf{x}_i) + v_r(\mathbf{x}_i), \quad (2)$$

* 1978 年 9 月 7 日收到.

v_l, v_r 分别为左、右金属的等效晶格场, 耦合的效果只表现为一边的电子会受到另一边的场作用. 两块金属相距越远, 这种作用就越弱. 相距无限远时, 两块金属相互独立, 其哈密顿量分别为

$$\begin{aligned} H_L &= \sum_i h_{li}, \quad h_{li} = \frac{P_l^2}{2m} + v_l(\mathbf{x}_i); \\ H_R &= \sum_i h_{ri}, \quad h_{ri} = \frac{P_r^2}{2m} + v_r(\mathbf{x}_i). \end{aligned} \quad (3)$$

单电子哈密顿量的本征态分别为 $\varphi_\mu^l(\mathbf{x})$ 和 $\varphi_\nu^r(\mathbf{x})$,

$$h_l \varphi_\mu^l(\mathbf{x}) = \mathcal{E}_\mu^l \varphi_\mu^l(\mathbf{x}), \quad h_r \varphi_\nu^r(\mathbf{x}) = \mathcal{E}_\nu^r \varphi_\nu^r(\mathbf{x}), \quad (4)$$

μ, ν 表示单电子态的全部量子数, $\mathbf{x} = (x, y, z)$, 波函数的自旋部分写成泡利列矢量. 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大, 可以近似地用 $(\varphi_\mu^l, \varphi_\nu^r)$ 构成体系的 Slater 波函数 $\psi_{(\mu\nu)}$. 我们只讨论金属中的电子, 在其中只取 (4) 式的束缚态解 (φ_μ^l) 与 (φ_ν^r) , 它们不包含电离态, 所以都不构成完备组; 它们分别属于两个完备组, 彼此不交,

$$A_{\mu\nu} = \langle \varphi_\mu^l | \varphi_\nu^r \rangle \approx 0. \quad (5)$$

因为只取束缚态, 耦合较弱时这个重叠积分很小, 并随两边距离的增大而指数式地趋于零.

为了得到较好的近似, 我们混合这种组态 $(\psi_{(\mu\nu)})$,

$$\phi(1 \cdots N) = \sum_{(\mu\nu)} c_{(\mu\nu)} \psi_{(\mu\nu)}(1 \cdots N), \quad (6)$$

迭加系数 $c_{(\mu\nu)}$ 由哈密顿量 (2) 式的变分条件来确定. 在把波函数写成 (6) 式的近似下, 我们不仅要求出基态与各激发态的近似能量, 还要求出一些其它力学量 (如电流) 的近似值, 以及态随时间变化的近似解.

二、变分法近似的数学形式

本节的讨论是普遍的, 不限于隧道体系, 所以不区分左右边态, 把角标 l, r 吸收到量子数 μ 中. 函数组 (φ_μ) 一般并不正交归一, 所以由它构成的 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么正的可逆线性变换 L , 把函数组 (φ_μ) 变换成另一正交归一化函数组 $(\tilde{\varphi}_\mu)$, 即

$$\tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{x}) = \sum_\nu \varphi_\nu(\mathbf{x}) L_{\nu\mu}, \quad \varphi_\mu(\mathbf{x}) = \sum_\nu \tilde{\varphi}_\nu(\mathbf{x}) L_{\nu\mu}^{-1}, \quad (7)$$

$$\sum_\nu L_{\mu\nu} L_{\nu\lambda}^{-1} = \sum_\nu L_{\mu\nu}^{-1} L_{\nu\lambda} = \delta_{\mu\lambda}, \quad (8)$$

$$\langle \tilde{\varphi}_\mu | \tilde{\varphi}_\nu \rangle = \delta_{\mu\nu}. \quad (9)$$

用这个正交归一化函数组来构成试探波函数

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

$$\tilde{\psi}_{(\mu)}(1 \cdots N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \tilde{\varphi}_{\mu_1}(\mathbf{x}_1) \cdots \tilde{\varphi}_{\mu_1}(\mathbf{x}_N) \\ \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \cdots \\ \tilde{\varphi}_{\mu_N}(\mathbf{x}_1) \cdots \tilde{\varphi}_{\mu_N}(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix}. \quad (10)$$

不难证明

$$\langle \tilde{\psi}_{(\mu)} | \tilde{\psi}_{(\nu)} \rangle = \delta_{(\mu)(\nu)}, \quad (11)$$

于是根据变分原理立即可得

$$\langle \tilde{\psi}_{(\mu)} | H - E | \psi \rangle = 0. \quad (12)$$

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 $(\tilde{\varphi}_{\mu})$ 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. Боголюбов^[9] 已证明若函数组 (φ_{μ}) 与 $(\tilde{\varphi}_{\mu})$ 由一可逆线性变换相联系, 则它们对于我们的变分问题来说是等价的. 这是由于由一可逆线性变换联系的两个函数组表示同一个子空间.

现在作两个推广. 第一, 上述讨论只要求 H 是厄米的, 因而不限于哈密顿量, 对于任何力学量 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

$$\left\langle \tilde{\psi}_{(\mu)} \left| H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right| \psi \right\rangle = 0, \quad (13)$$

当 $(\tilde{\varphi}_{\mu})$ 完备时, 这正是此表象中的薛定谔方程; 当 $(\tilde{\varphi}_{\mu})$ 不完备时, 则是近似的薛定谔方程.

一般地说, $(\tilde{\psi}_{(\mu)})$ 所张的空间是某一完备空间 $\{\tilde{\psi}_{(\mu)}\}$ 的一个子空间, 运用把全空间中任一函数 $\psi(1 \cdots N)$ 投影到此子空间 $(\tilde{\psi}_{(\mu)})$ 中的投影算符

$$P = \sum_{(\mu)} |\tilde{\psi}_{(\mu)}\rangle \langle \tilde{\psi}_{(\mu)}|, \quad (14)$$

可以把近似函数 (10) 式、本征方程 (12) 和薛定谔方程 (13) 写成

$$\psi(1 \cdots N) = P\phi(1 \cdots N), \quad (15)$$

$$P(H - E)P|\phi\rangle = 0, \quad P\left(H - i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\right)P|\phi\rangle = 0. \quad (16)$$

与严格的方程比较, 现在的近似相当于作如下代换:

$$H \rightarrow PHP, \quad F \rightarrow PFP, \quad E \rightarrow EP, \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t} P, \quad (17)$$

于是联系薛定谔绘景与海森伯绘景的么正变换为

$$\psi^H = e^{iFHP/\hbar} \psi^S, \quad PF^H P = e^{iFHP/\hbar} P F^S P e^{-iFHP/\hbar}, \quad (18)$$

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

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (PF^H P) = [PF^H P, PHP]. \quad (19)$$

可以看出, 我们的变分法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 $P \neq 1$, 上面给出近似的结果. 但近似

的好坏并不取决于 P 接近于 1 的程度, 而取决于在所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 $\tilde{\varphi}_\mu$ 态上的湮灭、产生算符记为 c_μ, c_μ^+ , 它们满足费密子反对易规则

$$\{c_\mu, c_\nu\} = \{c_\mu^+, c_\nu^+\} = 0, \{c_\mu, c_\nu^+\} = \delta_{\mu\nu}, \quad (20)$$

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

$$\tilde{\psi}_{(\mu)}(1 \cdots N) = c_{\mu_1}^+ \cdots c_{\mu_N}^+ \rangle, \quad (21)$$

$$F_1 = \sum_i f_1(i) = \sum_{\nu \in \mu} \sum_{\lambda \in \mu} c_\nu^+ \langle \tilde{\varphi}_\nu | f_1 | \tilde{\varphi}_\lambda \rangle c_\lambda, \quad (22)$$

$$F_2 = \sum_{i \neq j} f_2(i, j) = \sum_{\mu \in \mu} \sum_{\nu \in \mu} \sum_{\lambda \in \mu} \sum_{\rho \in \mu} c_\mu^+ c_\nu^+ \langle \tilde{\varphi}_\mu \tilde{\varphi}_\nu | f_2 | \tilde{\varphi}_\lambda \tilde{\varphi}_\rho \rangle c_\lambda c_\rho, \quad (23)$$

$$P_N = \sum_{(\mu)} c_{\mu_1}^+ \cdots c_{\mu_N}^+ \rangle \langle c_{\mu_N} \cdots c_{\mu_1}, \quad (24)$$

其中 $\sum_{\mu \in \mu}$ 表示求和遍及完备组 $\{\tilde{\varphi}_\mu\}$ 的全部量子数, \sum_μ 表示只遍及函数组 $(\tilde{\varphi}_\mu)$ 的量子数, 而 $\sum_{(\mu)}$ 表示对试探波函数所取的各种组合 (μ) 求和. 把 (22) 至 (24) 式代入 (17) 式, 即得变分法近似中力学量的二次量子化形式为

$$PF_1P = \sum_\nu \sum_\lambda c_\nu^+ \langle \tilde{\varphi}_\nu | f_1 | \tilde{\varphi}_\lambda \rangle c_\lambda \cdot P, \quad (25)$$

$$PF_2P = \sum_\mu \sum_\nu \sum_\lambda \sum_\rho c_\mu^+ c_\nu^+ \langle \tilde{\varphi}_\mu \tilde{\varphi}_\nu | f_2 | \tilde{\varphi}_\lambda \tilde{\varphi}_\rho \rangle c_\lambda c_\rho \cdot P, \quad (26)$$

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 $\psi(1 \cdots N)$. 所以若只限于在此子空间中运算, 则上两式右方的 P 可以省去. 与严格的 (22), (23) 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) . 这两式还可改写成

$$\int d\mathbf{x} \tilde{\psi}^+(\mathbf{x}) f_1(\mathbf{x}) \tilde{\psi}(\mathbf{x}), \quad \iint d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \tilde{\psi}^+(\mathbf{x}_1) \tilde{\psi}^+(\mathbf{x}_2) f_2(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \tilde{\psi}(\mathbf{x}_2) \tilde{\psi}(\mathbf{x}_1), \quad (27)$$

其中已经省去了 P , 而

$$\tilde{\psi}(\mathbf{x}) = \sum_\mu c_\mu \tilde{\varphi}_\mu(\mathbf{x}), \quad \tilde{\psi}^+(\mathbf{x}) = \sum_\mu c_\mu^+ \tilde{\varphi}_\mu^+(\mathbf{x}). \quad (28)$$

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_μ, c_μ^+) , 所以在运用时只需要知道函数组 $(\tilde{\varphi}_\mu)$ 即可.

三、正常金属隧道体系的近似哈密顿量

对已知函数组 (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, 基本上仍能区分左与右. 我们发现 Löwdin 变换^[9,10]满足此要求. Löwdin 变换是厄米的,

$$L^+ = L, (L^{-1})^+ = L^{-1}. \quad (29)$$

于是写成矩阵形式, 即有

$$\varphi(\mathbf{x}) = (\varphi_{\mu_1}, \dots, \varphi_{\mu_N}), \quad \tilde{\varphi}(\mathbf{x}) = (\tilde{\varphi}_{\mu_1}, \dots, \tilde{\varphi}_{\mu_N}), \quad (30)$$

$$s = \varphi^+ \varphi = (\tilde{\varphi} L^{-1})^+ (\tilde{\varphi} L^{-1}) = (L^{-1})^+ L^{-1} = L^{-2}, \quad (31)$$

$$s = (s_{\mu\mu'}), \quad s_{\mu\mu'} = \langle \varphi_\mu | \varphi_{\mu'} \rangle. \quad (32)$$

从(31)式可以解出 $L = s^{-\frac{1}{2}}$, $L^{-1} = s^{\frac{1}{2}}$, 当 s 与 1 相差很小时, 可以写成 $s = 1 + \Lambda$, 而把 L 和 L^{-1} 展开为 Λ 的幂级数

$$L = 1 - \frac{1}{2} \Lambda + \frac{3}{8} \Lambda^2 - \frac{5}{16} \Lambda^3 + \dots, \quad L^{-1} = 1 + \frac{1}{2} \Lambda - \frac{1}{8} \Lambda^2 + \frac{1}{16} \Lambda^3 - \dots. \quad (33)$$

代入(7)式, 即得 Löwdin 函数

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_\mu &= \varphi_\mu - \frac{1}{2} \sum_{\mu'} \varphi_{\mu'} \Lambda_{\mu'\mu} + \frac{3}{8} \sum_{\mu'} \sum_{\mu''} \varphi_{\mu'} \Lambda_{\mu'\mu''} \Lambda_{\mu''\mu} - \dots, \\ \varphi_\mu &= \tilde{\varphi}_\mu + \frac{1}{2} \sum_{\mu'} \tilde{\varphi}_{\mu'} \Lambda_{\mu'\mu} - \frac{1}{8} \sum_{\mu'} \sum_{\mu''} \tilde{\varphi}_{\mu'} \Lambda_{\mu'\mu''} \Lambda_{\mu''\mu} + \dots. \end{aligned} \quad (34)$$

用于隧道体系, 写明区分左、右的角标, 即得下列 Löwdin 函数:

$$\begin{aligned} \tilde{\varphi}_\mu^l &= \varphi_\mu^l - \frac{1}{2} \sum_\nu \varphi_\nu^r \Lambda_{\nu\mu} + \frac{3}{8} \sum_{\mu'} \sum_\nu \varphi_{\mu'}^l \Lambda_{\mu'\nu} \Lambda_{\nu\mu} - \dots, \\ \tilde{\varphi}_\nu^r &= \varphi_\nu^r - \frac{1}{2} \sum_\mu \varphi_\mu^l \Lambda_{\mu\nu} + \frac{3}{8} \sum_{\nu'} \sum_\mu \varphi_{\nu'}^r \Lambda_{\nu'\mu} \Lambda_{\mu\nu} - \dots. \end{aligned} \quad (35)$$

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

把(35), (2)两式代入(25)或(27)式, 再由性质(4)式, 即有

$$\langle \tilde{\varphi}_\mu^l | h | \tilde{\varphi}_{\mu'}^l \rangle \approx \langle \varphi_\mu^l | h | \varphi_{\mu'}^l \rangle \approx \mathcal{E}_\mu^l \delta_{\mu\mu'}, \quad \langle \tilde{\varphi}_\nu^r | h | \tilde{\varphi}_{\nu'}^r \rangle \approx \langle \varphi_\nu^r | h | \varphi_{\nu'}^r \rangle \approx \mathcal{E}_\nu^r \delta_{\nu\nu'}, \quad (36)$$

其中的计算只准确到 $\Lambda_{\mu\nu}$ 的一级. 于是有

$$H = H_L^a + H_R^a + H_T, \quad (37)$$

$$H_L^a = \sum_\mu \mathcal{E}_\mu^l c_\mu^{l+} c_\mu^l, \quad H_R^a = \sum_\nu \mathcal{E}_\nu^r c_\nu^{r+} c_\nu^r, \quad (38)$$

$$H_T = \sum_\mu \sum_\nu (T_{\mu\nu} c_\mu^{l+} c_\nu^r + T_{\mu\nu}^* c_\nu^{r+} c_\mu^l), \quad (39)$$

$$T_{\mu\nu} = \langle \tilde{\varphi}_\mu^l | h | \tilde{\varphi}_\nu^r \rangle, \quad T_{\mu\nu}^* = \langle \tilde{\varphi}_\nu^r | h | \tilde{\varphi}_\mu^l \rangle. \quad (40)$$

算符的对易关系由(20)式给出, 写明区分左、右的角标, 有

$$\{c_{\mu}^l, c_{\mu'}^l\} = \{c_{\nu}^r, c_{\nu'}^r\} = \{c_{\mu}^l, c_{\nu}^r\} = \{c_{\mu}^l, c_{\nu'}^r\} = 0, \{c_{\mu}^l, c_{\mu'}^{l+}\} = \delta_{\mu\mu'}, \{c_{\nu}^r, c_{\nu'}^{r+}\} = \delta_{\nu\nu'}. \quad (41)$$

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

$$T_{\mu\nu} = \left\langle \varphi_{\mu}^l \left| h - \frac{1}{2} (h_l + h_r) \right| \varphi_{\nu}^r \right\rangle = \left\langle \varphi_{\mu}^l \left| \frac{1}{2} (v_l + v_r) \right| \varphi_{\nu}^r \right\rangle, \quad (42)$$

由此可以看出 $T_{\mu\nu}$ 与 $\Lambda_{\mu\nu}$ 同数量级. 利用 (42) 式还可进一步推出以下公式:

$$T_{\mu\nu} = -i\hbar j_{\mu\nu}(x_1) - (\mathcal{E}_{\mu}^l - \mathcal{E}_{\nu}^r) \lambda_{\mu\nu}(x_1), \quad (43)$$

$$j_{\mu\nu}(x_1) = \int dy \int dz \frac{-i\hbar}{2m} \left\{ \varphi_{\mu}^{l+}(x_1, y, z) \frac{\partial}{\partial x_1} \varphi_{\nu}^r(x_1, y, z) - \left[\frac{\partial}{\partial x_1} \varphi_{\mu}^{l+}(x_1, y, z) \right] \varphi_{\nu}^r(x_1, y, z) \right\}, \quad (44)$$

$$\lambda_{\mu\nu}(x_1) = \int dy \int dz \left\{ \frac{1}{2} \int_{x_1}^{\infty} dx \varphi_{\mu}^{l+}(\mathbf{x}) \varphi_{\nu}^r(\mathbf{x}) - \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{x_1} dx \varphi_{\mu}^{l+}(\mathbf{x}) \varphi_{\nu}^r(\mathbf{x}) \right\}, \quad (45)$$

x_1 是位垒中的任意一点. (43) 式也准确到 $\Lambda_{\mu\nu}$ 的一级. 当 $\mathcal{E}_{\mu}^l \approx \mathcal{E}_{\nu}^r$ 时, 由 (43) 式立即可得 Bardeen 公式^[2]

$$T_{\mu\nu} = -i\hbar j_{\mu\nu}(x_1) \quad \text{当 } \mathcal{E}_{\mu}^l \approx \mathcal{E}_{\nu}^r \text{ 时}. \quad (46)$$

对于镜式散射对称方位阱模型, (42) 式给出的结果与 Prange^[4] 和 Kleinman 等人^[11] 的相同.

为了解释 (37) 式的物理含意, 我们还要求出在变分法近似下右边粒子数算符 \bar{N}_R 的二次量子化形式. 根据下述定义:

$$\bar{N}_R = \int_{x_1}^{\infty} dx \int dy \int dz \tilde{\varphi}^+(\mathbf{x}) \tilde{\varphi}(\mathbf{x}), \quad (47)$$

不难算出准确到 $\Lambda_{\mu\nu}$ 一级的公式

$$\bar{N}_R = N_R + n_L - n_R + n_T, \quad (48)$$

$$N_R = \sum_{\nu} c_{\nu}^{r+} c_{\nu}^r, \quad n_L = \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \gamma_{\mu\mu'}^l(x_1) c_{\mu}^{l+} c_{\mu'}^l, \quad n_R = \sum_{\nu} \sum_{\nu'} \gamma_{\nu\nu'}^r(x_1) c_{\nu}^{r+} c_{\nu'}^r, \quad (49)$$

$$n_T = \sum_{\mu} \sum_{\nu} [\lambda_{\mu\nu}(x_1) c_{\mu}^{l+} c_{\nu}^r + \lambda_{\mu\nu}^*(x_1) c_{\nu}^{r+} c_{\mu}^l],$$

$$\gamma_{\mu\mu'}^l(x_1) = \int_{x_1}^{\infty} dx \int dy \int dz \varphi_{\mu}^{l+}(\mathbf{x}) \varphi_{\mu'}^l(\mathbf{x}), \quad \gamma_{\nu\nu'}^r(x_1) = \int_{-\infty}^{x_1} dx \int dy \int dz \varphi_{\nu}^{r+}(\mathbf{x}) \varphi_{\nu'}^r(\mathbf{x}). \quad (50)$$

积分 $\lambda_{\mu\nu}(x_1)$, $\gamma_{\mu\mu'}^l(x_1)$, $\gamma_{\nu\nu'}^r(x_1)$ 都与 $\Lambda_{\mu\nu}$ 同数量级. N_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 $\bar{N}_R = N_R$. 这表明在零级近似下右边的粒子数等于右边态 ($\tilde{\varphi}_{\nu}^r$) 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}_R 与 N_R 准确到 $\Lambda_{\mu\nu}$ 的一级是等价的. 这就表明, 虽然在 Löwdin 函数 $\tilde{\varphi}_{\mu}^l$ 中混有少量左边金属的单电子态 φ_{μ}^l , 还是可以合理地把它称为右边态. 同样, 可以合理地把它称为左边态. 此外, 从 (41) 式可以看出左边态与右边态是互相独立的. 可以进一步证明 $[H_L^2, H_R^2] = 0$. 因而对于 (37) 式可作如下物理解释: 若把 H_T 当作微扰, 则左边态 ($\tilde{\varphi}_{\mu}^l$) 和右边态 ($\tilde{\varphi}_{\nu}^r$) 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块金属各自的单电子束缚态, 而 H_T 引起它们之间的跃迁, 使电子从一块金属跃迁到另一块金属, 隧道电流

j_x 正比于右边态上粒子数的变化率 \dot{N}_R . 把 (37), (49) 式代入近似的海森伯运动方程 (19), 即得

$$j_x = cN_R = \frac{e}{i\hbar} [N_R, H] = -\frac{e}{i\hbar} \sum_{\mu} \sum_{\nu} [T_{\mu\nu} c_{\mu}^{i+} c_{\nu}^i - T_{\mu\nu}^* c_{\nu}^{i+} c_{\mu}^i]. \quad (51)$$

四、超导体隧道体系的近似哈密顿量

我们关心的是超导体之间的耦合行为, 为了简单起见, 对于超导体本身我们采用 BCS^[42] 的约化模型, 假设在超导体中电子之间为 δ 型两体相互作用^[13,6]

$$\begin{aligned} w(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= w_l(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) + w_r(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2), \\ w_l(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \begin{cases} w_{l0}\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) & \text{当 } \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \text{ 在左边金属中,} \\ 0 & \text{否则;} \end{cases} \\ w_r(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) &= \begin{cases} w_{r0}\delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) & \text{当 } \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \text{ 在右边金属中,} \\ 0 & \text{否则.} \end{cases} \end{aligned} \quad (52)$$

这里 $w_{l0}, w_{r0} < 0$, 并随不同的超导体而不同. 运用两体算符的近似公式 (26) 和 Löwdin 函数 (35) 式, 即可求出此相互作用项 $w(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 在变分法近似下的二次量子化形式, 保留到 $A_{\mu\nu}$ 的一次项, 有

$$\begin{aligned} W &= W_L + W_R + W_T, \quad (53) \\ W_L &= \frac{1}{2} \sum_{\mu_1} \sum_{\mu_2} \sum_{\mu_3} \sum_{\mu_4} c_{\mu_1}^{i+} c_{\mu_2}^{i+} \langle \varphi_{\mu_1}^i \varphi_{\mu_2}^i | w_l | \varphi_{\mu_3}^i \varphi_{\mu_4}^i \rangle c_{\mu_3}^i c_{\mu_4}^i, \\ W_R &= \frac{1}{2} \sum_{\nu_1} \sum_{\nu_2} \sum_{\nu_3} \sum_{\nu_4} c_{\nu_1}^{r+} c_{\nu_2}^{r+} \langle \varphi_{\nu_1}^r \varphi_{\nu_2}^r | w_r | \varphi_{\nu_3}^r \varphi_{\nu_4}^r \rangle c_{\nu_3}^r c_{\nu_4}^r, \\ W_T &= \Sigma [\langle \tilde{\varphi}_{\mu_1}^i \tilde{\varphi}_{\mu_2}^i | w | \tilde{\varphi}_{\mu_3}^i \tilde{\varphi}_{\mu_4}^i \rangle c_{\mu_1}^{i+} c_{\mu_2}^{i+} c_{\mu_3}^i c_{\mu_4}^i + \langle \tilde{\varphi}_{\nu_1}^r \tilde{\varphi}_{\nu_2}^r | w | \tilde{\varphi}_{\nu_3}^r \tilde{\varphi}_{\nu_4}^r \rangle c_{\nu_1}^{r+} c_{\nu_2}^{r+} c_{\nu_3}^r c_{\nu_4}^r] + h.c.. \end{aligned} \quad (54)$$

把 W 加到上节正常金属隧道体系哈密顿量 (37) 式中, 就得到超导体隧道体系哈密顿量的近似形式为

$$H^s = H_L^s + H_R^s + H_T + W_T, \quad H_L^s = H_L^s + W_L, \quad H_R^s = H_R^s + W_R. \quad (55)$$

运用对易关系 (41) 式很容易证明哈密顿量 H_L^s 与 H_R^s 是对易的, $[H_L^s, H_R^s] = 0$. 这表明 H_L^s 与 H_R^s 分别描述两个互相独立的体系, 在零级近似下它们给出的电子能谱与两块孤立超导体的一样. 微扰项 $H_T + W_T$ 引起电子在左边态与右边态之间跃迁, 所以可以形式上称这两项为隧道相互作用项. 计算隧道电流时, 把 (49), (55) 式代入 (19) 式, 可得与正常金属完全相同的 (51) 式.

与 CFP 模拟哈密顿量相比, 我们的结果多一项 W_T , 它包括两类过程: 一类与 H_T 的过程相同, 但其强度强烈地依赖于电子态的统计分布, 即强烈地依赖于温度, 我们对于镜式对称方位阱模型的计算表明这种依赖于温度的电流约为 H_T 项引起的电流的万分之一; 另一类表示一边的两个电子互相碰撞后有一个跳到了另一边去, 这是一个双粒子过程, 它对电流的贡献与 H_T 相仿, 而强度亦强烈地依赖于温度, 其大小较难估算, 但看来也不会比前一类大.

引起散射项 W_T 的电子-电子相互作用 $w(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ 实际上是电子-声子相互作用和电子-电子库仑作用的净的效果。在超导性问题中, 电子之间交换虚声子引起的散射是主要因素, 电子间的库仑作用已经屏蔽在一极短距离内 (在隧道体系中, 氧化层对两边的电子又有一静电屏蔽作用), 因而 W_T 引起的电流可以认为是一边的电子与另一边的电子交换虚声子而散射的过程。如果不采用约化的两体相互作用模型 (52) 式, 而较严格地处理电子-晶格振动相互作用, 则除了与 W_T 相当的交换虚声子的过程外, 还包括实声子过程。用前面所发展的近似方法不难处理这种过程。如果忽略两块金属的边界效应, 并假设它们的晶格运动没有耦合, 可以得到除去电子之间库仑作用以外的耦合隧道电子-晶格体系哈密顿量中包含电子算符部分的近似形式 (保留到 $A_{\mu\nu}$ 的一级) 为

$$H = H_L + H_R + H_T + H_{Te-p}, \quad H_L = H_L^e + H_{Le-p}^l, \quad H_R = H_R^e + H_{Re-p}^r, \quad (56)$$

$$H_{Le-p}^l = \sum_{\mu} \sum_{\mu'} \sum_{\mathbf{k}_l} \sum_{\lambda_l} v_{\mu\mu'}^l(\mathbf{k}_l, \lambda_l) \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}_l, \lambda_l}}} c_{\mu}^{l+} c_{\mu'}^l (b_{\mathbf{k}_l, \lambda_l} + b_{-\mathbf{k}_l, \lambda_l}^+),$$

$$H_{Re-p}^r = \sum_{\nu} \sum_{\nu'} \sum_{\mathbf{k}_r} \sum_{\lambda_r} v_{\nu\nu'}^r(\mathbf{k}_r, \lambda_r) \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}_r, \lambda_r}}} c_{\nu}^{r+} c_{\nu'}^r (b_{\mathbf{k}_r, \lambda_r} + b_{-\mathbf{k}_r, \lambda_r}^+), \quad (57)$$

$$H_{Te-p} = H_{Te-p}^l + H_{Te-p}^r = \sum_{\mu} \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{k}_l} \sum_{\lambda_l} \left[\tau_{\mu\nu}^l(\mathbf{k}_l, \lambda_l) \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}_l, \lambda_l}}} c_{\mu}^{l+} c_{\nu}^r (b_{\mathbf{k}_l, \lambda_l} + b_{-\mathbf{k}_l, \lambda_l}^+) \right. \\ \left. + h.c. \right] + \sum_{\mu} \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{k}_r} \sum_{\lambda_r} \left[\tau_{\mu\nu}^r(\mathbf{k}_r, \lambda_r) \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_{\mathbf{k}_r, \lambda_r}}} c_{\mu}^{l+} c_{\nu}^r (b_{\mathbf{k}_r, \lambda_r} \right. \\ \left. + b_{-\mathbf{k}_r, \lambda_r}^+) + h.c. \right], \quad (58)$$

$\hbar\omega_{\mathbf{k}\lambda}$ 是波矢 \mathbf{k} 、极化 λ 的声子的能量, $b_{\mathbf{k}\lambda}$, $b_{\mathbf{k}\lambda}^+$ 是相应声子的湮灭、产生算符, ν 和 τ 是有关的矩阵元。从这个哈密顿量出发, 若再计及电子间的库仑作用, 我们预期能够证明上面采用的简化模型 (52) 式是合理的。(52) 式实际上只保留了 (56) 式中导致电子间交换虚声子的 Fröhlich 相互作用的那部分电子-声子相互作用, 因而它忽略了 H_{Te-p} 项对隧道电流的直接贡献, 即一边的电子吸收或放出一个声子而跃迁到另一边去的一级过程。Taylor 与 Burstein 等人^[4]的实验表明这种有实声子参与的隧道电流效应并不总是可以忽略的。

五、结 语

本文提出了一个运用变分法近似来处理量子力学多粒子体系的方案, 把它运用于超导体隧道体系, 并采用 Löwdin 变换作为此理论所要求的可逆正交化线性变换, 我们得到了超导体隧道体系的近似哈密顿量。看来这是从微观理论上论证 CFP 模拟哈密顿量的一条有希望的途径。这个方案可以很自然地处理有声子参与的隧道电流效应。处理氧化层结构对隧道电流的影响以及杂质、外场的效应等等都没有原则上的困难。关键在于: 选择的试探波函数的基底 (φ_{μ}) 必须是线性无关组; Löwdin 级数 (33) 式必须是收敛的。对于这两个问题很难作出普遍的讨论, 我们相信对于隧道体系它们是成立的。

我们的结果比 CFP 模拟哈密顿量多一项 W_T , 它来自两边电子间的两体相互作用。

对于导致超导性的 BCS 型相互作用,估计这种项的效应不会大于 H_T 项的万分之一.若保留到重迭积分的二级,则还会包括两边的电子被氧化层反射以及两个电子同时通过隧道的过程.后者对隧道电流提供了一个新的有别于 Josephson 电流的机制,但其效应是很弱的.

我们得到的无耦合体系单粒子本征态 $\bar{\varphi}_\mu$,实际上已经包含了两边电子态的混合.这种混合是重迭积分的一级效应,在零级近似下它才完全等同于真正无耦合的单电子本征态 φ_μ .这种混合的效果,会在两边金属的能级密度、超导能隙和转变温度等方面表现出来.定量地估算一下这种效应是有意义的.

本工作是在王竹溪教授的热心指导下完成的,作者特此表示衷心的感谢.

附 录

Prange 的公式中系数的不确定性

采用 Prange 的符号.他讨论附图 1 中一维无限深对称方位阱 $V(x)$ 模型,把单粒子哈密顿量的本征解记为 $\{e_k(x), o_k(x)\}$, $e_k(x)$ 具有偶宇称, $o_k(x)$ 具有奇宇称.此外,把方位阱

$$V_1(x) = \begin{cases} V(x) & x > -b, \\ V_0 & x \leq -b \end{cases} \quad (\text{A.1})$$

的单粒子哈密顿量的本征解 $\phi_k(x)$ 定义为右边态,把其空间反演态

$$\chi_k(x) = \phi_k(-x) \quad (\text{A.2})$$

定义为左边态.为了同时用 $\{\phi_k\}$ 和 $\{\chi_k\}$ 来表示对称方位阱 $V(x)$ 的单粒子本征态,并使其低能量的本征态亦用相应的低能态 ϕ_k 和 χ_k 来表达,Prange 采用下述表象:

$$e_k(x) = \sum_m [\phi_m(x) + \chi_m(x)] \lambda_{mk}, \quad (\text{A.3})$$

$$o_k(x) = \sum_m [\phi_m(x) - \chi_m(x)] \mu_{mk}. \quad (\text{A.4})$$

但是表象 (A.3) 和 (A.4) 式中的 λ_{mk} 和 μ_{mk} 是不能确定的,有任意性,原因是 $\{\phi_m\}$ 本身是完备的, $\{\chi_m\}$ 本身也是完备的,所以不能用 $\{\phi_m\}$ 和 $\{\chi_m\}$ 同时展开.具体证明如下:

设 $\omega(x)$ 为一任意的奇函数,即 $\omega(-x) = -\omega(x)$. 令

$$f_k(x) = \frac{1}{2} e_k(x) + \omega(x), \quad (\text{A.5})$$

并把 $f_k(x)$ 用 ϕ_m 展开,得

$$f_k(x) = \sum_m \phi_m \lambda_{mk}. \quad (\text{A.6})$$

把 x 改为 $-x$, 并注意 (A.2) 式,有

$$f_k(-x) = \sum_m \chi_m \lambda_{mk}. \quad (\text{A.7})$$

但 $e_k(x) = f_k(x) + f_k(-x)$, 故

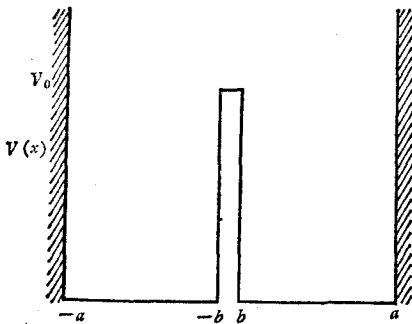
$$e_k(x) = \sum_m (\phi_m + \chi_m) \lambda_{mk},$$

这就是 (A.3) 式. 由于 ω 是一个任意的奇函数,所以 λ_{mk} 有任意性.

同样,设 $\rho(x)$ 为一任意的偶函数,即 $\rho(-x) = \rho(x)$. 令

$$g_k(x) = \frac{1}{2} o_k(x) + \rho(x), \quad (\text{A.8})$$

则有 $o_k(x) = g_k(x) - g_k(-x)$, 若把 $g_k(x)$ 用 ϕ_m 展开,得



附图 1

$$g_k(x) = \sum_m \phi_m \mu_{mk}, \quad g_k(-x) = \sum_m \chi_m \mu_{mk}, \quad (\text{A.9})$$

于是有

$$o_k(x) = g_k(x) - g_k(-x) = \sum_m (\phi_m - \chi_m) \mu_{mk}.$$

这就是(A.4)式, 其中 μ_{mk} 有任意性.

上述证明是王竹溪教授给出的.

参 考 文 献

- [1] M. H. Cohen, L. M. Falicov and J. C. Phillips, *Phys. Rev. Lett.*, **8** (1962), 316.
- [2] J. Bardeen, *Phys. Rev. Lett.*, **6** (1961), 57.
- [3] M. H. Cohen, L. M. Falicov and J. C. Phillips, Proc. 8th Inter. Conf. on Low Temp. Phys., Butterworths, London (1963), 173.
- [4] R. E. Prange, *Phys. Rev.*, **131** (1963), 1083.
- [5] J. R. Schrieffer, *Rev. Mod. Phys.*, **36**(1) Part 1(1964), 200.
- [6] A. Schmid, *Z. Phys.*, **178**(1) (1964), 26.
- [7] J. R. Waldram, *Reports on Progress in Physics*, **39** (1976), 751.
- [8] I. Giaever, K. Megerle, *Phys. Rev.*, **122** (1961), 1101.
- [9] Н. Н. Боголюбов, 量子统计学(中译本), 杨崇译, 科学出版社, 北京(1959).
- [10] P. O. Löwdin, *J. Chem. Phys.*, **18** (1950), 365.
- [11] L. Kleinman, B. N. Taylor and E. Burstein, *Rev. Mod. Phys.*, **36**(1) Part 1 (1964), 208.
- [12] J. Bardeen, L. N. Cooper and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.*, **108** (1957), 1175.
- [13] А. А. Абрикосов, Л. П. Горьков, И. Е. Дзялошинский, 统计物理学中的量子场论方法(中译本), 郝柏林译, 科学出版社, 北京(1963).
- [14] B. N. Taylor, E. Burstein, *Phys. Rev. Lett.*, **10** (1963), 14.

AN APPROXIMATE HAMILTONIAN OF SUPERCONDUCTOR TUNNELING SYSTEM TREATED BY VARIATIONAL METHOD

WANG ZHENG-XING

(Department of Technical Physics, Peking University)

ABSTRACT

The variational approximation method developed by Bogolyubov et al. is generalized to treat the dynamical problems of superconductor tunneling system, which results in establishing the approximate expressions, in second quantization representation, for the equation of motion, the Hamiltonian of superconductor tunneling system and the operators of tunneling current in this variational approximation scheme. The Hamiltonian obtained, $H = H_L + H_R + H_T + W_T$, consists of three parts: H_L describes the behaviours of the metal on the left hand side of the sample; while H_R the behaviours of the metal on the right hand side; and $H_T + W_T$ the coupling between them. H_L and H_R are commutable with each other, and their expressions are the same as two isolating metals, except that the states of single electron are slightly mixed. The formula of matrix elements of H_T is identical with that of Bardeen. The effect of W_T is approximately 10000 times less than that of H_T , hence W_T may be neglected. It is demonstrated that as far as the first order terms in our variational approximation method is concerned, the model Hamiltonian assumed by Cohen et al. applies, while Prange's treatment for this problem is proved to be inappropriate.