看上去有两个表面的系统为什么只有一个表面态？

王怀玉

1. 问题的提出

在第三章 **3.7.2** 小节的例 **1**，我们求解了如下的一个边值问题。

$$u''(x)+\lambda u(x)=0, 0\le x\le 1, u'(0)-\alpha u(0)=0, u'(1)-\beta u(1)=0 \quad \textbf{(1)}$$

得到了特征函数集是一组

$$u_n(x)=\sqrt{\frac{2}{n^2\pi^2+\alpha^2}}\,(\alpha\sin\mu_n x+n\pi\cos\mu_n x) \quad \textbf{(2)}$$

加上一个

$$u_\alpha(x)=\sqrt{\frac{2\alpha}{e^{2\alpha}-1}}e^{\alpha x} \quad \textbf{(3)}$$

这两种解是有明确的物理意义的。

式**(2)**是求解区间内的一组振动模式。它们描述在整个区间内的整体的运动。这组模式是与边界条件有关的。若区间两个端点是固定不动的，振动模式显然是最简单的$\sin n\pi x$的形式。现在边界条件显示端点不是固定的。因此，振动模式比较复杂。不管怎么说，这样的解中，$\boldsymbol{\mu_n}$这个量，类似于波矢的作用。

式**(3)**是与边界有关的解，他表明边界上的位移是指数变化的形式。这是因为现在端点不是固定不动的。若两个端点是固定不动的，则端点处的唯一始终为零，就没有式**(3)**这个解。在这个解中，没有类似于波矢的这样一个量，因为这个解不是正弦或者余弦形式的。

现在的问题是：这个区间有两个端点，为什么只有一个边界态？

根据直观的感觉，一个区间，既然有两个端点，那么就应该有两个表面态。表示两个端点都会有移动。这是最早由 **Fowler** 教授在 **1933** 年提出来的。大家也就自然而然地接受了这个观点。

如果只有一个表面态，难道只有一个端点会运动？为什么另一个端点不运动？是哪一个端点不运动呢？

2. 数学研究的结论

北京大学物理系的任尚元教授(现已退休)，根据二阶微分方程中的定理，严格证明了：在一维有限长度的体系中，只有一个表面态。假如一维有限长度的晶体有 ***N*** 个格点等间隔地组成，端点的格点不固定(比如可以是周期性边界条件)，那么，根据晶体的理论，它应该有 ***N*** 个本征态。其中，有 ***N*–1** 个是“体内”的态。另外有一个是“表面”的态。

当我们说体内有 ***N*–1** 个态是什么意思？在固体理论中，我们知道，能量本征值是用能带来描述的，量子数是用晶体内的波矢 ***k*** 来标志的，能量 ***E*** 是波矢 ***k*** 的函数，***E*(*k*)**。在固体物理中，我们被告知，一个能带中，***k*** 的数目刚好有 ***N***

个当然也就有 N 个本征态了，也就是说，体内的行波，也称为布洛赫波，的数目刚好与格点的数目是相等的。

任尚元教授的研究告诉我们，体内描述行波的量子数 **k** 的个数只有 $N-1$ 个，而不是人们长久以来以为的是 N 个。因此体内只有 $N-1$ 个布洛赫波。另外还有一个表面态，这个表面态是不能用波矢 k 来指标的。

任尚元进一步研究了二维和三维有限晶体的情况。得到的结论如下。

(1). 二维有限晶体

一个二维晶体，假如是长方形的，那么，它有条边作为它的“表面”，还有个角。顶角处的行为显然与“表面”应该有所不同的。

假定长方形的，那么，它有 **4** 个“表面”和 **4** 个角。假定沿着两条直角边方向的格点数分别有 N_1, N_2 个。晶体内总的格点数目是 $N = N_1 N_2$ 个。那么这个系统中，总的状态是个。其中，有

$(N_1 - 1)(N_2 - 1)$ 个类体态，也就是常说的布洛赫态，

$(N_1 - 1) + (N_2 - 1)$ 个类边态，

1 个顶角态。

总的本征态的数目是：

$$(N_1 - 1)(N_2 - 1) + (N_1 - 1) + (N_2 - 1) + 1 = N_1 N_2 = N$$

总的状态数是与晶体内的格点总数相同的。

(2). 三维有限晶体

一个三维晶体，假定长方体形状的，那么，它有 **6** 个表面，**12** 条边，**8** 个角。假定沿着三条直角边方向的格点数分别有 N_1, N_2, N_3 个。晶体内总的格点数目是 $N = N_1 N_2 N_3$ 个。那么这个系统中，总的状态是个。其中，有

$(N_1 - 1)(N_2 - 1)(N_3 - 1)$ 个类体态，也就是常说的布洛赫态，

$(N_1 - 1)(N_2 - 1) + (N_2 - 1)(N_3 - 1) + (N_3 - 1)(N_1 - 1)$ 个类表面态，

$(N_1 - 1) + (N_2 - 1) + (N_3 - 1)$ 个类边态，

1 个顶角态。

总的本征态的数目是：

$$\begin{aligned}&(N_1 - 1)(N_2 - 1)(N_3 - 1)\\&+(N_1 - 1)(N_2 - 1) + (N_2 - 1)(N_3 - 1) + (N_3 - 1)(N_1 - 1)\\&+(N_1 - 1) + (N_2 - 1) + (N_3 - 1) + 1 = N_1 N_2 N_3 = N\end{aligned}$$

总的状态数是与晶体内的格点总数相同的。

关于任尚元的研究成果，有兴趣的同学可以看他的专著。

[1] 任尚元，《有限晶体中的电子态 **Bloch** 波的量子限域》，北京大学出版社，**2006** 年第一版。

[2] Shang Yuan Ren, 《Electronic States in Crystals of Finite Size Quantum Confinement of Bloch Waves》, Spring Tracts in Modern Physics Volume 270, Second edition, 2017.

3. 一个物理解释

现在我们试图对于式**(1)**的边值问题为什么只有一个表面态给一个物理解释。

设想，在二维或者三维空间中有一个区域 ***V***，它的边界，也就是表面，称为 ***D***。在其中立一个二阶常微分方程的边值问题如下。

$$u''(\boldsymbol{r})+\lambda u(\boldsymbol{r})=0, \boldsymbol{r}\in V, B(u(\boldsymbol{r}))|_{r\in D}=\varphi(\boldsymbol{r}) \quad \textbf{(4)}$$

其中，边界条件是 $B(u(\boldsymbol{r}))|_{r\in D}=\varphi(\boldsymbol{r})$ 。式**(4)**式常见的边值问题。

比较式**(1)**和式**(4)**可知，前者的边界条件有两个方程，二后者的边界条件只有一个方程。为什么二维和三维的边界条件只需要一个方程，而一维的需要两个条件呢？二维和三维只有一个边界条件，是因为只有一个表面。那么，为什么一维会出现两个方程，它是不是有两个表面呢？

实际上一维也只有一个表面。只不过由于一维空间的特殊性，它的表面表现为两个端点，看上去似乎是分开的。它们不能看作是两个表面，而是只有一个表面，这两个端点是一个表面上的两个点。只不过这两个点没有连在一起。既然它们没有连在一起，写边界条件的时候，就只好分开来写。

结论：一维有限长度的系统只有一个表面，因此，只有一个表面态。