



The Series of Advanced Physics of Peking University

北京大学物理学丛书

有限晶体中的电子态

Bloch 波的量子限域

任尚元 著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS



The Series of Advanced Physics of Peking University

北京大学物理学丛书

有限晶体中的电子态

Bloch 波的量子限域

任尚元 著



北京大学出版社
PEKING UNIVERSITY PRESS

图书在版编目(CIP)数据

有限晶体中的电子态: Bloch 波的量子限域/任尚元著. —北京:
北京大学出版社, 2006. 5
(北京大学物理学丛书)
ISBN 7-301-09646-1

I. 有… II. 任… III. 固体理论 IV. 0481

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 101758 号

书 名: 有限晶体中的电子态: Bloch 波的量子限域

著作责任者: 任尚元 著

责任编辑: 孙 琰

标准书号: ISBN 7-301-09646-1/O · 0664

出版发行: 北京大学出版社

地 址: 北京市海淀区成府路 205 号 100871

网 址: <http://cbs.pku.edu.cn> 电子信箱: zpup@pup.pku.edu.cn

电 话: 邮购部 62752015 市场营销中心 62750672 编辑部 62752021

排 版 者: 兴盛达打字服务社 58740533

印 刷 者: 北京大学印刷厂

经 销 者: 新华书店

850 毫米×1168 毫米 32 开本 8.375 印张 215 千字

2006 年 5 月第 1 版 2006 年 5 月第 1 次印刷

定 价: 16.00 元

未经许可, 不得以任何方式复制或抄袭本书之部分或全部内容。

版权所有, 侵权必究

举报电话: (010)62752024 电子邮箱: fd@pup.pku.edu.cn

《北京大学物理学丛书》 第二届编委会名单

主 任：高崇寿

副 主 任：（按姓氏笔画排，下同）

编 委：	刘 寄 星	陈 晓 林	周 月 梅	夏 建 白
	聂 玉 昕	阎 守 胜	黄 涛	
	冯 世 平	田 光 善	孙 昌 璞	朱 星
	朱 邦 芬	宋 菲 君	肖 佐	邹 振 隆
	林 宗 涵	欧 阳 钟 灿	俞 允 强	胡 岗
	闻 海 虎	顾 卫 宇	韩 汝 珊	解 思 深

前 言

物理学是自然科学的基础,是探讨物质结构和运动基本规律的前沿学科.几十年来,在生产技术发展的要求和推动下,人们对物理现象和物理学规律的探索研究不断取得新的突破.物理学的各分支学科有着突飞猛进的发展,丰富了人们对物质世界物理运动基本规律的认识和掌握,促进了许多和物理学紧密相关的交叉学科和技术学科的进步.物理学的发展是许多新兴学科、交叉学科和新技术学科产生、成长和发展的基础和前导.

为适应现代化建设的需要,为推动国内物理学的研究、提高物理教学水平,我们决定推出《北京大学物理学丛书》,请在物理学前沿进行科学研究和教学工作的著名物理学家和教授对现代物理学各分支领域的前沿发展做系统、全面的介绍,为广大物理学工作者和物理系的学生进一步开展物理学各分支领域的探索研究和学习,开展与物理学紧密相关的交叉学科和技术学科的研究和学习提供研究参考书、教学参考书和教材.

本丛书分两个层次.第一个层次是物理系本科生的基础课教材,这一教材系列,将几十年来几代教师,特别是在北京大学教师的教学实践和教学经验积累的基础上,力求深入浅出、删繁就简,以适于全国大多数院校的物理系使用.它既吸收以往经典的物理教材的精华,尽

可能系统地、完整地、准确地讲解有关的物理学基本知识、基本概念、基本规律、基本方法；同时又注入科技发展的新观点和方法，介绍物理学的现代发展，使学生不仅能掌握物理学的基础知识，还能了解本学科的前沿课题和研究动向，提高学生的科学素质。第二个层次是研究生教材、研究生教学参考书和专题学术著作。这一系列将集中于一些发展迅速、已有开拓性进展、国际上活跃的学科方向和专题，介绍该学科方向的基本内容，力求充分反映该学科方向国内外前沿最新进展和研究成果。学术专著首先着眼于物理学的各分支学科，然后再扩展到与物理学紧密相关的交叉学科。

愿这套丛书的出版既能使国内著名物理学家和教授有机会将他们的累累硕果奉献给广大读者，又能对物理的教学和科学研究起到促进和推动作用。

《北京大学物理学丛书》编辑委员会

1997年3月

内 容 提 要

晶体中电子态的理论是现代固体物理学的基础。传统的固体物理学中的电子态的理论实质上是一个无限晶体中的电子态的理论。但是,任何真实晶体的尺寸都是有限的。作者在本书中提出了一个关于理想有限晶体和低维系统中的电子态和 Bloch 波的量子限域效应的新理论,提供了一些关于理想低维系统和有限晶体电子态的准确的、普遍的基本认识,其中一些结论与固体物理学界的传统看法有很大不同。

献给任基成先生,杨代廉女士

中 文 版 序

路漫漫其修远兮，吾将上下而求索。

——屈原《离骚》

本书是作者多年来对现代固体物理学中的一个基本物理问题思考的结果。

本书的内容可能看起来比较专门，但实际上讨论的是固体物理学这门和实际应用有着密切联系的重要基础学科里的最基础的问题。在本书的英文版^①由 Springer 出版社出版后，作者很高兴其中文版也能很快出版。

学过固体物理学的人都知道，晶体中的电子态的理论是这门科学的基础。现代固体物理学是建立在一个以 Bloch 波来描述晶体中的电子态的理论的基础上的，它实质上是一个无限晶体中的电子态的理论。这个理论取得了巨大的成功。如果说，现代科学和技术的许多方面能发展到今天这个地步，是得益于或甚至是完全建立在这个理论的成功的基础上的，是并不过分的。

但是，这个传统理论不可能被用来处理从 20 世纪 70 年代左右开始迅猛发展的、与亚微米和纳米尺度的晶体中的电子态有关的物理问题。对于这样一些小尺度晶体中的电子态，虽然过去并没有一个普遍性的一般理论，但在固体物理学界还是有许多理论研究工作，也有一些多年来逐渐形成的传统看法。

本书提出了一个有限晶体中的电子态的理论，其许多结论和

^① Shang Yuan Ren. Electronic States in Crystals of Finite Size: Quantum Confinement of Bloch waves. Springer Tracts in Modern Physics, vol. 212. New York: Springer, 2006.

固体物理学界的许多传统的看法有很大的不同,也和传统的固体物理学中的晶体中电子态的理论的结果有很大不同。本书的许多结论正确与否,当然还需要经过实验和时间的检验。但单从理论基础而言,究竟哪个理论更为合理,读者应当不难作出自己的判断。如果有读者认为本书提出的有限晶体中的电子态的理论更为合理,那就不难看到,作者所做的还只刚刚是个开始。相对于传统的固体物理学这样一门经过 70 多年发展已经相当全面、深入和成熟的学科,能否和如何发展出一套系统的基于有限晶体中的电子态理论的固体的物理性质和固体中物理过程的理论,我们还所知甚少,或者基本上还一无所知,这个领域还基本上是一块处女地。要真正认识清楚亚微米和纳米尺度的晶体的物理性质及其中的物理过程,还有很长的路要走。也许经过若干年以后,固体物理科学会有个和目前非常不同的面貌。从事数学或理论物理这样严格科学研究的人都知道,“无限”和“有限”之间常常存在一个很高的门槛甚至一道壁垒。跨过这个门槛,穿越这道壁垒,将又是一个繁花似锦的崭新天地。

黄昆先生在世时,作者曾就有关问题以及一些结果和先生进行过多次讨论,并得到了先生的充分肯定和鼓励。此书正式出版前,先生就过早仙逝。作者未能将本书呈献在先生面前,哪怕是在病床前,这是作者深感遗憾的。

作者感谢任尚芬教授在本书中文版的准备阶段的许多帮助。本书中文版得到了国家自然科学基金(NSFC No. 10434010)的部分资助;还得到了北京大学出版社和孙琰女士的许多帮助。连树声老师和王正行教授对作者寻找王国维在《人间词话》里所讲到的有关做学问的三种境界的词牌原文给予了热情帮助。在此,一并致谢。

任尚元

于北京大学中关村

2005 年 10 月

英文版序^①

晶体中的电子态的理论是现代固体物理学的基础。在传统的固体物理学中,晶体中的电子态的理论是建立在 Bloch 定理的基础上的,它实质上是一个无限晶体中的电子态的理论。然而,任何真实晶体的尺寸都是有限的,这是一个人们必须面对的物理事实。实际有限尺度的晶体中的电子态与由 Bloch 定理所给出的电子态之间的差别随着晶体尺寸的减小而愈加显著。能够清楚地认识实际有限尺度的晶体中的电子态,在理论上和实际上都具有相当重要的意义。多年以前,作者还是北京大学的一个学生,在学习固体物理学时就感到其中周期性边条件的普遍应用并不很令人信服,至少我们应该对于这样一个重大简化的影响能有清晰的理解;后来作者发现他的很多同学也有同样的感觉。在许多固体物理学的书中,作者发现只有在玻恩 (M. Born) 和黄昆合著的 *Dynamic Theory of Crystal Lattices*^② 这一经典著作的附录中对此问题有一个比较仔细的讨论。

本书试图在理解 Bloch 波的量子限域效应的基础上来发展一个理想有限晶体中的电子态的理论。长期以来,缺少平移不变性一直是发展有限尺度晶体中的电子态的一般理论的一个主要障碍。在本书中,作者发现这个障碍可以通过利用具有周期系数的二阶微分方程的数学理论来克服:在一些简单而重要的理想低维系统和有限尺度的晶体中,可以得到电子态的普遍的和严格的解

① 这是根据作者为本书英文版所撰写的序言翻译的。

② Born M, Huang K. *Dynamic Theory of Crystal Lattices*. Oxford: Clarendon, 1954.

析解。本书中得到的一些结果与固体物理学界的许多传统看法有很大的不同。

本书包括五部分：第一部分简单阐述为什么我们需要一个有限尺度晶体中的电子态的理论。第二部分研究一维半无限和有限晶体中的电子态的问题，这一部分的绝大多数结论都可以严格证明。第三部分研究三维晶体中的低维系统或有限晶体中的电子态。虽然作者认为这一部分的基础是严格的，但是其推理过程在很大程度上是建立在物理直觉上的，因为必要、严格的相应的数学理论现在还并不具备。第四部分是结束语。第五部分是两个附录。第二、三部分里各章节的内容是密切相关的，希望读者能按顺序来阅读。如果没有前面章节的准备，读者也许会觉得后面的章节较难理解。虽然本书的目的是发展一个有限尺度晶体中的电子态的理论，但正是建立在平移不变性之上的对传统固体物理学中的晶体的电子态的清楚认识，为这样一个新理论提供了基础。

作者在写作本书时经常感到，数学家和固体物理学家对于彼此所关心的问题及其结果互相不够熟悉。本书的主要数学基础是 Eastham 的 *The Spectral Theory of Periodic Differential Equations*^①。这本书已出版 30 多年，但是书中的许多重要结果却似乎并不为固体物理学界所知。虽然 Bloch 函数是现代固体物理学中的电子态理论的一个最基本的函数，但除了它能表达成平面波函数和周期函数的乘积这一点以外，这个函数的一些普遍性质实际上并不为固体物理学界所广泛知晓。在很长的一段时期内，作者对于 Bloch 函数的认识也只限于这一点，结果在一些问题上花了很多时间却并无显著进展。一次偶然的机会，作者看到了 Eastham 的书。开始，他对于那些看起来困难的数学内容也有些望而生畏，但是后来他作了一些努力去读懂这本书，并把新学到的数学

① Eastham M S P. *The Spectral Theory of Periodic Differential Equations*. Edinburgh: Scottish Academic Press, 1973.

结果应用于有关的物理问题上。本书基本上就是这些努力的结果。

除了 Eastham 的这本书以外,作者还受益于两本经典著作: Courant 和 Hilbert 的 *Methods of Mathematical Physics*^① 以及 Titchmarsh 的 *Eigenfunction Expansions Associated with Second-Order Differential Equations*^②. 这两本书中的一些定理非常有力,如果这些很多年前出版的书中的定理能够被固体物理学界清楚、广泛地理解的话,很多关于低维系统电子态的误解早就可以澄清了。可惜的是,这些好书现在已经不再出版了。现在功能越来越强的数值计算方法的广泛应用无疑为人们对低维系统的理解作出了重大贡献,然而,作者希望本书的出版能够引起广大读者对于用解析方法来研究这些非常重要又很有挑战性的问题的兴趣。至少,它和数值计算方法是可以互为重要补充的。从根本上来说,对于一个物理问题真正透彻和深入的认识通常可以从一个包含有问题的最基本物理内涵的简单化模型的解析理论来得到。

作者很高兴能有这个机会来感谢黄昆教授多年来的指导、帮助和讨论。正是他引导作者进入了固体物理学的领域。作者也很感谢李爱扶(Avril Rhys)女士,黄昆教授的夫人。她的关心和帮助是作者在写作此书过程中最为感激的体验之一。作者也希望感谢彭桓武教授与作者分享他在 20 世纪 40 年代固体物理学早期的经验以及多次有益的讨论。作者为有机会聆听黄昆教授和彭桓武教授谈及他们当年与玻恩教授工作时的经历而感到荣幸。

作者感谢 John D. Dow、郭汉英、韩汝珊、Walter A. Harrison、马中骐、任尚芬、王正行、吴思诚、阎守胜、杨乐、余树祥、曾谨言、张平和张平文等教授的讨论和帮助。他感谢宣宇琳和阮志凌

① Courant R, Hilbert D. *Methods of Mathematical Physics*. New York: Interscience, 1953.

② Titchmarsh E C. *Eigenfunction Expansions Associated with Second-Order Differential Equations*. Oxford: Oxford University, 1958.

两位同学的帮助;也感谢程伟博士在有关计算机应用方面的许多帮助。

最后,作者感谢他的家庭成员,特别是妻子伟敏,女儿宇健和宇慧,女婿卫东和健,孙辈娜娜、阳阳和威威。他们的关爱和支持不仅给了他很多的家庭乐趣,也给了他力量和勇气去战胜人们有时不得不面对的磨难,这才有了本书的诞生。

任尚元

北京大学中关园

2005年3月



任尚元, 北京大学物理学院教授、博士生导师。1963年毕业于北京大学物理系, 1963—1966年师从黄昆先生就读半导体物理理论的研究生。曾任中国科学技术大学教授; 从1978年起曾在美国多所大学任访问学者或访问教授。长期从事固体物理理论、量子力学及其相关领域的教学、科研工作, 发表研究论文90余篇, 其中一些被广泛引用。

目 录

第一部分 为什么我们需要一个有限晶体中的 电子态的理论

第一章 绪论	(3)
§ 1.1 建立于平移不变性基础上的晶体中的电子态	(4)
§ 1.2 几种典型晶体的能带结构	(6)
§ 1.3 传统固体物理学中晶体中电子态理论的 基本困难	(8)
§ 1.4 有效质量近似	(10)
§ 1.5 一些数值结果	(12)
§ 1.6 本书的主题及主要结果	(15)
参考文献	(19)

第二部分 一维半无限晶体和理想有限晶体

第二章 数学准备知识	(25)
§ 2.1 二阶线性常微分方程理论初步和 两个基本定理	(26)
§ 2.2 Floquet 理论	(28)
§ 2.3 周期系数二阶线性常微分方程的判别式和 线性独立解的形式	(33)
§ 2.4 一维晶体中电子态的微分方程的基本理论	(36)
2.4.1 两个本征值问题	(37)
2.4.2 $D(\lambda)$ 随 λ 的变化	(38)

§ 2.5	一维晶体的能带结构	(43)
§ 2.6	周期系数二阶线性常微分方程的解的零点的 几个定理	(48)
	参考文献	(52)
第三章	一维半无限晶体的表面态	(54)
§ 3.1	基本考虑	(55)
§ 3.2	两个有关定理	(57)
§ 3.3	理想半无限晶体中的表面态	(60)
§ 3.4	V_{out} 有限的情况	(64)
§ 3.5	与前人工作的比较和讨论	(68)
	参考文献	(70)
第四章	理想一维有限晶体中的电子态	(72)
§ 4.1	基本考虑	(72)
§ 4.2	两种不同类型的电子态	(74)
§ 4.3	依赖于 τ 的电子态	(81)
§ 4.4	一维对称有限晶体里的电子态	(85)
§ 4.5	对于有效质量近似的评论	(88)
§ 4.6	关于表面态的评论	(90)
§ 4.7	两个其他的讨论	(94)
4.7.1	关于能带形成的讨论	(94)
4.7.2	关于边界位置的讨论	(94)
§ 4.8	小结	(94)
	参考文献	(95)

第三部分 低维系统和有限晶体

第五章	理想量子膜中的电子态	(99)
§ 5.1	一个有关定理	(100)
§ 5.2	定理的推论	(105)