

PACS numbers: 02.30.-f, 68.35.B-, 68.35.Md, 68.49.Jk, 68.65.Cd, 73.20.At, 73.21.Cd

Застосування методи конформних відображень до дослідження електронного спектру віцинальних поверхонь

В. М. Бурдейний, В. Х. Касіяненко

*Вінницький національний технічний університет,
Хмельницьке шосе, 95,
21021 Вінниця, Україна*

Метод конформних відображень запропоновано для дослідження електронного спектру віцинальних поверхонь утворених періодично впорядкованим масивом терас. Встановлено Якобіан переходу при подвійному конформному відображенні, яким елементарна комірка системи відображається в комірку канонічної форми. Хвильові функції, дисперсійне рівняння та його розв'язки знайдено в основному наближенні за малими реально спостережуваними значеннями кута неузгодженості атомарних площин.

Conformal mapping method is proposed to study electron spectrum of vicinal surfaces formed by periodically ordered arrays of terraces. The Jacobian for the double conformal mapping of system unit cell into the cell with the canonical form is determined. The wave function, dispersion equation and its solutions in the main approximation relative to the small observed values of displacement angle are found.

Метод конформных отображений предложен для исследования электронного спектра вицинальных поверхностей, сформированных периодически упорядоченным массивом террас. Установлен якобиан перехода при двойном конформном отображении, которым элементарная ячейка системы отображается в ячейку, имеющую каноническую форму. Волновая функция, дисперсионное уравнение и его решения найдены в основном приближении по малым реально наблюдаемым значениям угла рассогласования атомных плоскостей.

Ключові слова: віцинальна поверхня, конформне відображення, Бреггове відбивання, хвильове рівняння, енергетичний спектр.

Key words: vicinal surface, conformal mapping, Bragg reflection, wave equation, energy spectrum.

Ключевые слова: вицинальная поверхность, конформное отображение,

брегговское отражение, волновое уравнение, энергетический спектр.

(Отримано 21 листопада 2018 р.; після доопрацювання — 25 лютого 2019 р.)

1. ВСТУП

Віцинальні поверхні кристалу формуються у вигляді терас, які утворені атомарними площинами з низькими значеннями Міллерових індексів, відділених одна від одної сходинками, які належать атомарним площинам з більшими кристалічними індексами. Між сходинками має місце «взаємодія» типу відштовхування, в силу чого вони утворюють регулярний періодичний масив. Чи не в першу чергу, завдяки цій періодичності інтерес до вивчення віцинальних поверхонь як модельних систем для дослідження електронних властивостей високопорядкованих наноструктур продовжує залишатися стабільно високим. Річ у тім, що система терас, розділених рівновіддаленими сходинками, прекрасно моделює двовимірний та одновимірний конфайнмент електронів і кросовер між цими типами утримання електронів. З іншого боку, як відзначається авторами роботи [1], віцинальні поверхні можуть служити ідеальними шаблонами для створення масивів самозбірних наноконструкцій. Ланцюжки періодичної сітки сходинок стають притягальними центрами, де чужорідні атоми, відкладаючись, утворюють квантові нанодропи, квантові кластери та квантові точки з бажаними, добре контрольованими та надійно відтворюваними параметрами. Значний інтерес до дослідження віцинальних поверхонь пов'язаний з багатообіцяючою перспективою застосування їх для реалізації каталітичних реакцій.

Важливо відзначити, що дослідження віцинальних граней стимулюється прогресом у технології очистки, полірування, відпалу, йонного розпорошення, що при комплексному застосуванні уможливорює одержати поверхні з наперед заданими і у значній мірі контрольованими параметрами. Потужною мотивацією досліджень є можливість виконувати високоточні вимірювання з використанням фотоемісійної спектральної аналізи [2]. Поза конкуренцією, як відзначається в оглядовій роботі [3], знаходиться фотоемісійна спектроскопія з високою кутовою та енергетичною роздільними здатностями, яка уможливорює здійснювати сканування енергетичних зон по енергії та квазіімпульсу. Згадана робота [3] містить багатий бібліографічний матеріал, який базується, як на власних дослідженнях цієї групи, так і на результатах інших авторів. Застосування фотоемісійної спектроскопії з розділенням по куту щодо дослідження електронної структури геометрично неоднорідних поверхонь, якими є віцинальні грані, а також методика обробки експериментальних результатів, в де-

талях описано авторами робіт [4, 5]. Продовжує залишатися високоінформативним використання дифракції повільних електронів і методи сканувальної тунельної мікроскопії.

Накопичений багатий експериментальний матеріал вимагає теоретичного тлумачення, розробки моделей, які б уможливили описати і пояснити спостережувані закономірності, а також прогнозувати властивості синтезованих матеріалів.

Найбільшого розвитку досягли моделі, які свого часу пропонувалися для дослідження поверхневих Таммових квантових станів і квантових станів Шоклі з використанням наближення майже вільних електронів або альтернативне наближення сильного зв'язку. Наближення майже вільних електронів в силу цілком зрозумілих причин знаходить своє застосування для аналізу результатів експериментальних досліджень віцинальних поверхонь металів, в першу чергу, шляхетних металів першої групи.

Природно, що розрив деяких хемічних зв'язків атомами поверхні приводить до реконструкції поверхні, зміни постійних кристалічної ґратниці, як і інших релаксаційних ефектів, які проявляються у модифікації самоузгодженого кристалічного потенціалу, яка може бути прогнозована лише у загальних рисах. Тому, як правило, доводиться звертатися до модельних потенціалів. Традиційним і найширше використовуваними є Діраків гребінець і потенціал Кроніґа–Пенні [1, 6–11], параметри яких вибираються так, щоб досягти задовільного узгодження з експериментальними результатами. Біля поверхні металу електрон перебуває також під дією індукованого потенціалу, роль якого була об'єктом ряду досліджень, прикладом яких є подані у роботі [12, 13]. Крім потенціалу у явному вигляді, не менш серйозною є проблема крайових умов. Навіть у наближенні ізотропної ефективної маси, коли змінні у хвильовому рівнянні повністю розділяються, задовольнити крайовим умовам, які накладаються на хвильову функцію, в силу нетривіальної, тобто неканонічної, геометрії віцинальної грані стає неможливим. Добре відомі успіхи згаданих вище моделей, тим не менше, стимулюють пошуки альтернативних підходів, один з яких пропонується в даній роботі.

2. ОПИС МОДЕЛЮ І МЕТОДИ

Тут розглядається електронний спектер віцинальної грані у металі чи напівпровіднику з ізотропним параболічним законом дисперсії. Декартову систему координат вибрано так, що одна з її осей є паралельною сходинок віцинальної поверхні, вісь v є перпендикулярною, а вісь u є паралельною оптичній площині. В силу вибору ізотропного закону дисперсії та описаної системи координат, у рівнянні Шредінґера, записаного у наближенні ізот-

ропної ефективної маси, координата, яка відповідає рухові вздовж сходинок чи терас, відділяється від координат, які стосуються руху у площині, перпендикулярній сходинкам. Перший із цих рухів описується пласкою хвилею, тоді як вивчення руху в системі координат (u, v) зводиться до розв'язання рівняння Шредінгера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_w^2 \Psi = E \Psi, \quad (1)$$

де E — енергія, відрахована від енергетичної зони $E_c + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m$, яка асоційована з поздовжнім щодо сходинок рухом, а $\Psi \equiv \Psi(u, v)$ — хвильова функція, яка стосується руху в площині, перпендикулярній до віцинальної грані, геометрію якої, разом з характерними параметрами, подано на рис. 1.

На рисунку 1 c — довжина сходинки, d — ширина тераси, (a, h) — координати одного з атомів оптичної площини. Сходинки разом із терасами формують періодичний масив. Елементарну ґратницю цієї періодичної структури з періодом b на рис. 1 виділено штриховкою.

У моделю, який тут розглядається, не враховується релаксація поверхневих атомів чи то реконструкція поверхні. Що ж до кристалічного поля ідеального кристалу, то воно враховується прийнятими наближеннями ефективної маси й енергією дна зони E_c . Таким чином, подальше дослідження стосується виключно впливу геометрії віцинальної грані на електронні стани обмеженого нею кристалу.

В прийнятому моделю з розгляду виключається потенціальна енергія, яку покладено рівною нулю, завдяки чому хвильове рівняння зводиться до формули (1). Рівняння (1) за своєю структурою також допускає розділення змінних. Проте, насправді такий підхід реалізувати неможливо, оскільки координати електрона «переплутуються» за рахунок нетривіальної геометричної форми крайового контуру, який має вигляд періодичної ламаної лінії, частково зображеної на рис. 1. Ця обставина вносить в задачу ге-

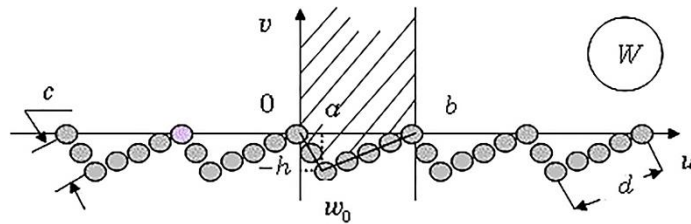


Рис. 1. Схематичне зображення перерізу кристалу площиною, перпендикулярною віцинальній грані.¹

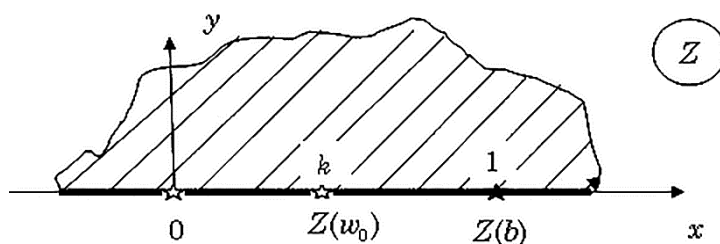


Рис. 2. Образ елементарної комірки в комплексній півплощині Z .²

ометричний потенціал, природа якого й аналітичні вирази для деяких випадків детально досліджені авторами роботи [14]. Згаданий потенціал виникає як наслідок модифікації оператора Бельтрамі–Ляпласа при переході до системи координат, в якій крайовий контур мав би одну з канонічних форм.

Перехід до такої системи координат у роботі пропонується здійснити шляхом подвійного конформного перетворення. Першим перетворенням виділена на рис. 1 елементарна комірка відображається на верхню півплощину комплексної площини Z з відповідністю точок, яку подано на рис. 2. Наступним перетворенням на цю ж область відображається прямолінійна півсмуга, яку зображено на рис. 3. Таким чином, описаною комбінацією перетворень досягається відображення елементарної комірки області W в таку область площини ζ , межа якої вже допускає розділення змінних. Проте, ціною цього спрощення є таке перетворення оператора Бельтрамі–Ляпласа, яке при врахуванні співвідношень Коші–Рімана приводить до наступної форми хвильового рівняння:

$$-\frac{\hbar^2}{2mD} \nabla_{\zeta}^2 \Psi = E\Psi, \tag{2}$$

де Якобіан переходу D від змінних (u, v) до змінних (ξ, η) визна-

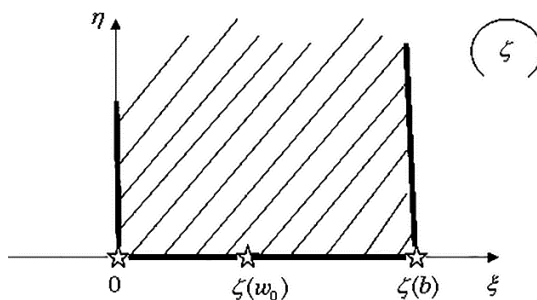


Рис. 3. Образ елементарної комірки в комплексній півплощині ζ .³

чається співвідношенням:

$$D = \left| \frac{dw}{d\zeta} \right|^2. \quad (3)$$

З формальної точки зору рівняння (2) може розглядатися як рівняння Шредингера для частинки з координатозалежною масою і воно, взяте само по собі, торкається фундаментальних проблем квантової механіки, які пов'язані з побудовою операторів динамічних змінних і необхідністю усунути неоднозначність в упорядкуванні операторів координат і спряжених імпульсів. Тут прийнято схему упорядкування, запропоновану в роботі [15], яку для одновимірних задач апробовано і в деталях обговорено багатьма авторами, наприклад у [16–18]. Варто також зауважити, що, на відміну від згаданих робіт, у даному випадку має місце рух з більш складною, ніж одновимірна, топологією.

3. КОНФОРМНІ ПЕРЕТВОРЕННЯ ЕЛЕМЕНТАРНИХ КОМІРОК

Елементарна комірка, виділена на рис. 1, у комплексній площині W за своєю геометричною формою є опуклим чотирикутником з однією вершиною, яка перебуває у нескінченно віддаленій точці. Кути при вершинах у точках 0 , $w_0 = a - ih$ і b подано у традиційній для комплексної аналізи формі відповідно зі співвідношеннями $(3/2 - \alpha - \delta)\pi$, $\pi\alpha$, $(1/2 + \delta)\pi$. Конформне відображення цієї області на верхню півплощину комплексної площини Z здійснюється застосуванням формули Рімана–Крістоффеля [19], а саме,

$$w = C \int_0^z t^{1/2-(\alpha+\delta)} (k-t)^{\alpha-1} (1-t)^{\delta-1/2} dt \quad (4)$$

з відповідністю точок, вказаною на рис. 2 і поданою у таблиці.

В якості канонічної області, на межах якої можливе тривіальне розділення змінних, як вже зауважено раніше, вибирається прямокутна півсмуга, зображена на рис. 3.

Півсмуга, подана на рис. 3, є трикутником з вершиною у нескінченно віддаленій точці. Його конформне відображення у пів-

ТАБЛИЦЯ. Відповідність точок при конформних відображеннях.⁴

W	0	$w_0 = a - ih$	B
Z	0	$Z(w_0) = k$	$Z(b) = 1$
ζ	0	$\zeta(w_0) = (2l/\pi) \arcsin(k)^{1/2}$	$\zeta(b) = l = 1$

площину комплексної площини z , як і у попередньому випадку, виражається інтегралом Крістоффеля–Шварца:

$$\zeta = A \int_0^z t^{-1/2} (1-t)^{-1/2} dt, \quad (5)$$

який після інтегрування зводиться до наступної форми:

$$\zeta = 2A \operatorname{arcsin}(z)^{1/2}. \quad (6)$$

Параметри конформних відображень (4) і (5) встановлюються на основі відповідності характерних точок, а саме, вершин многокутників, яку наведено у таблиці.

Співвідношення (6) в поєднанні з даними останнього стовпця таблиці уможливилює одразу ж записати вираз

$$A = l / \pi, \quad (7)$$

яким визначається коефіцієнт A . Варто зауважити, що тут і надалі зберігається позначення l для координати точки $\zeta(b)$, що спрощує контроль за розмірностями.

Відповідність точок елементарної комірки і точок площини Z приводить до наступних співвідношень:

$$a - ih = C \int_0^k t^{1/2-(\delta+\alpha)} (k-t)^{\alpha-1} (1-t)^{\delta-1/2} dt, \quad (8)$$

$$b = C \int_0^1 t^{1/2-(\delta+\alpha)} (k-t)^{\alpha-1} (1-t)^{\delta-1/2} dt. \quad (9)$$

Застосування теореми синусів уможливилює виразити координати вершини w_0 через період ґратниці b і кутові змінні, що дає рівняння

$$\frac{N(k)}{I(k)} = \frac{\sin \pi(\alpha + \delta)}{\sin \pi \delta} = \frac{d}{c}, \quad (10)$$

розв'язавши яке, можна знайти параметер k , залежно від характерних кутів α і δ . У рівнянні (10) d — довжина тераси, c — довжина сходинки, а функції $I(k)$ і $N(k)$ визначаються інтегралами:

$$I(k) = \int_0^k t^{1/2-(\delta+\alpha)} (k-t)^{\alpha-1} (1-t)^{\delta-1/2} dt, \quad (11)$$

$$N(k) = \int_k^1 t^{1/2-(\delta+\alpha)} (t-k)^{\alpha-1} (1-t)^{\delta-1/2} dt. \quad (12)$$

Кожен із цих інтегралів, згідно з таблицями [20], виражається в термінах Гауссової гіпергеометричної функції ${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; x)$, з врахуванням чого можна записати:

$$I(k) = k^{1/2-\delta} \frac{\Gamma(3/2 - \alpha - \delta)\Gamma(\alpha)}{\Gamma(3/2 - \delta)} {}_2F_1(1/2 - \delta, 3/2 - \alpha - \delta; 3/2 - \delta; k),$$

$$N(k) = (1-k)^{\alpha+\delta-1/2} \frac{\Gamma(1/2 + \delta)\Gamma(\alpha)}{\Gamma(1/2 + \delta + \alpha)} {}_2F_1(\alpha + \delta - 1/2, 1/2 + \delta; 1/2 + \alpha + \delta; 1-k),$$

де $\Gamma(x)$ — Ойлерова гама-функція.

Одержані співвідношення разом із (10) складають замкнену систему рівнянь, яка уможливорює знайти параметер k при довільних значеннях кутових мір α і δ . Проте, з огляду на геометрію реально існуючих і досліджуваних віцинальних поверхонь, інтерес викликають випадки малих кутів розходження, що відповідає умові $\delta \ll 1$. В границі $\delta \rightarrow 0$ тераса і сходінка зливаються, а тому $\alpha \rightarrow 1$ і з врахуванням відповідних явних виразів для гіпергеометричних функцій

$$I(k) = k^{1/2} \frac{\Gamma(1/2)}{\Gamma(3/2)} {}_2F_1(1/2, 1/2; 3/2; k) = 2\arcsin\sqrt{k},$$

$$N(k) = (1-k)^{1/2} \frac{\Gamma(1/2)}{\Gamma(3/2)} {}_2F_1(1/2, 1/2; 3/2; 1-k) = 2\arcsin\sqrt{1-k},$$

рівняння (10) набуває такої форми:

$$\frac{\arcsin\sqrt{1-k}}{\arcsin\sqrt{k}} = \frac{\sin\pi(\alpha + \delta)}{\sin\pi\delta} = \frac{d}{c}, \quad (13)$$

Розв'язок цього рівняння має наступний вигляд:

$$k = \sin^2 \left[\frac{\pi c}{2(d+c)} \right], \quad (14)$$

звідки при $\delta \ll 1$, коли $w_0 \rightarrow 0$, можна одержати більш простий наближений результат, за яким

$$k = \left(\frac{\pi c}{2d} \right)^2.$$

Вважаючи параметер k відомим, стає можливим знайти коефіцієнт C . З умови відповідності характерних точок випливає, що має місце співвідношення $CI(k) = a - ih$, з якого випливає

$$|C|^2 = (a^2 + h^2) / I^2(k) = c^2 / I^2(k). \quad (15)$$

Отже, сумісний розгляд рівнянь (10) і (15) повністю розв'язує проблему параметрів конформних відображень (4) і (5).

Результат (15) істотно спрощується для практично важливого випадку, що відповідає раніше описаним умовам, а саме, $\delta \ll 1$, $k \rightarrow 0$. Оскільки при цьому $I(k) \approx \pi c/d$, то для $|C|^2$ одержуємо:

$$|C|^2 = d^2/\pi^2. \quad (16)$$

Співвідношенням (16) у хвильове рівняння (2) природнім способом вводиться параметер з розмірністю довжини, який збігається з шириною тераси.

4. ЯКОБІАН ПЕРЕХОДУ ДО КООРДИНАТ У КОМПЛЕКСНІЙ ПЛОЩИНІ

Конформне відображення оператора Бельтрамі–Ляпласа при збереженні явного вигляду цього оператора приводить до появи мультиплікативного фактора, який пов'язаний з перетворенням координат і у відповідності з формулою (3) виражається в термінах похідної $dw/d\zeta$, для якої з врахуванням (4) і (5) впливає наступне співвідношення:

$$\frac{d\zeta}{dw} = \frac{A}{C} \left[z^{\delta+\alpha-1} (k-z)^{1-\alpha} (1-z)^{-\delta} \right], \quad (17)$$

Підстановка (6) і (7) в записаний вище результат дає:

$$\frac{d\zeta}{dw} = \frac{l}{\pi C} \left[\left(\sin \frac{\pi\zeta}{2l} \right)^{2(\delta+\alpha-1)} \left(k - \sin^2 \frac{\pi\zeta}{2l} \right)^{1-\alpha} \left(\cos \frac{\pi\zeta}{2l} \right)^{-2\delta} \right]. \quad (18)$$

Прийнявши до уваги разом із формулою (3) позначення $\zeta = \xi + i\eta$, остаточно можна одержати:

$$D \equiv D(\xi, \eta) = \frac{\pi^2 |C|^2}{4^{1-\alpha} l^2} \left[\frac{\left(\operatorname{ch} \frac{\pi\eta}{l} - \cos \frac{\pi\xi}{l} \right)^2}{\left(k - \frac{1}{2} \right)^2 + \left(k - \frac{1}{2} \right) \operatorname{ch} \frac{\pi\eta}{l} \cos \frac{\pi\xi}{l} + \frac{1}{8} \left(\operatorname{ch} \frac{2\pi\eta}{l} + \cos \frac{2\pi\xi}{l} \right)} \right]^{1-\alpha} \times (19) \\ \times \left(\frac{\operatorname{ch} \pi\eta/l + \cos \pi\xi/l}{\operatorname{ch} \pi\eta/l - \cos \pi\xi/l} \right)^{2\delta},$$

Точна формула (19) справедлива при довільних співвідношеннях між геометричними параметрами віцинальної поверхні. Про-

те, в силу складності цього виразу, можливість одержання на його основі кількісних результатів видається проблематичною. Істотне спрощення опирається на не раз відзначений у цій роботі факт, за яким для більшості досліджених і досліджуваних випадків кут розходження $\delta \ll 1$. Оскільки при цьому і параметер k набагато менший від одиниці, то в основному порядку за цим параметром із формули (19) впливає співвідношення

$$D(\xi, \eta) \approx \frac{\pi^2 |C|^2}{l^2} \left(\frac{\operatorname{ch} \frac{\pi\eta}{l} + \cos \frac{\pi\xi}{l}}{\operatorname{ch} \frac{\pi\eta}{l} - \cos \frac{\pi\xi}{l}} \right)^{2\delta}, \quad (20)$$

яке і буде використовуватися в подальших викладках.

5. КВАНТУВАННЯ РУХУ, ПАРАЛЕЛЬНОГО ОПТИЧНІЙ ПЛОЩИНІ

Область, подана на рис. 1, одержується паралельним перенесенням зображеної там же елементарної комірки вздовж осі u . У площині ζ цьому відповідають трансляції вздовж осі ξ на вектор $(l, 0)$. В такий спосіб рівняння (2) приводиться до рівняння з коефіцієнтами, періодично залежними від ξ , в силу чого його розв'язки мають задовольняти Блоховій теоремі [21]. Таким чином, хвильові функції можуть класифікуватися квазіхвильовим числом, позначеним як Q і яке змінюється в першій Бріллюєновій зоні, тобто $Q \in (-\pi/l, \pi/l]$. Отже, за згаданою теоремою хвильова функція допускає представлення у формі добутку:

$$\Psi(\xi, \eta) = e^{iQ\xi} \Psi_Q(\xi, \eta), \quad (21)$$

в якому модульовальний множник $\Psi_Q(\xi, \eta)$ є періодичною функцією ξ з періодом l . Періодичність функції $\Psi_Q(\xi, \eta)$ уможливорює записати її розвинення у ряд Фур'є за формулою:

$$\Psi_Q(\xi, \eta) = \sum_n e^{ig_n \xi} \Psi_{Qn}(\eta), \quad (22)$$

де $g_n = 2\pi n/l$ — цілий вектор оберненої ґратниці. Поєднання співвідношень (22) і (21) дає для хвильової функції такий вираз:

$$\Psi(\xi, \eta) = e^{iQ\xi} \sum_n e^{ig_n \xi} \Psi_{Qn}(\eta). \quad (23)$$

Підстановка (23) у (2) з подальшим оберненим перетворенням Фур'є щодо хвильової функції $\Psi_{Qn}(\eta)$, яку можна асоціювати із рухом у напрямку, поперечному до оптичної площини, приво-

дить до наступного рівняння:

$$\left[\frac{\hbar^2 (\mathbf{Q} + \mathbf{g}_n)^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right] \Psi_{Q_n}(\eta) = E \sum_m \frac{1}{l} \int_0^l e^{i\xi(\mathbf{g}_m - \mathbf{g}_n)} D(\xi, \eta) \Psi_{Q_m}(\eta) d\xi. \quad (24)$$

Після розвинення Якобіяну $D(\xi, \eta)$ в ряд Фур'є за формулою

$$D(\xi, \eta) = \sum_n e^{i\mathbf{g}_n \xi} D_n(\eta), \quad (25)$$

в якій Фур'є-амплітуди $D_n(\eta)$, залежні від поперечної координати η , визначаються співвідношенням

$$D_n(\eta) = \frac{1}{l} \int_0^l D(\xi, \eta) e^{-i\mathbf{g}_n \xi} d\xi \quad (26)$$

і задовольняють умові $D_n^*(\eta) = D_{-n}(\eta)$, для функцій $\Psi_{Q_n}(\eta)$ випливає рівняння:

$$\left[\frac{\hbar^2 (\mathbf{Q} + \mathbf{g}_n)^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right] \Psi_{Q_n}(\eta) = E \left[D_0(\eta) \Psi_{Q_n}(\eta) + \sum_{m \neq n} D_{n-m}(\eta) \Psi_{Q_m}(\eta) \right], \quad (27)$$

де вже виділено діагональний матричний елемент переходу між станами з цілими векторами оберненої ґратниці.

Якщо у рівнянні (27) знехтувати переплутуванням станів з різними значеннями цілих векторів оберненої ґратниці, тобто сумою у правій частині (27), змінні повністю розділяються, і рух паралельно оптичній площині у розширеному оберненому просторі описується параболічним законом дисперсії, а у моделю приведених зон спектер є безщільним і складається із частин згаданої параболи. Цей висновок повністю повторює результати наближення квазивільних електронів. При подальшому застосуванні теорії збурень, як і у стандартному випадку, який стосується періодичного кристалічного поля ідеального кристалу [21], вже у другому порядку у зв'язку із Брегговим розсіянням виникає необхідність точного врахування станів, для яких виконуються умови Вульфа-Бреггів. Якщо ця умова виконується для вектора \mathbf{g}_n , то відповідні рівняння матимуть вигляд:

$$\left[\frac{\hbar^2 \mathbf{Q}^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right] \Psi_{Q_0}(\eta) = E \left[D_0(\eta) \Psi_{Q_0}(\eta) + D_{-n}(\eta) \Psi_{Q_n}(\eta) \right], \quad (28)$$

$$\left[\frac{\hbar^2 (\mathbf{Q} + \mathbf{g}_n)^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right] \Psi_{Q_n}(\eta) = E \left[D_0(\eta) \Psi_{Q_n}(\eta) + D_n(\eta) \Psi_{Q_0}(\eta) \right]. \quad (29)$$

В нехтуванні квантовими переходами, тобто доданками, які пропорційні $D_{\pm n}(\eta)$, із (28) і (29) впливають рівняння, які мають однакову структуру, а саме,

$$\left[T(Q, n) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right] \Psi(\eta) = ED_0(\eta)\Psi(\eta), \quad (30)$$

де $T(Q, n)$ — внесок кінетичної енергії, пов'язаної із рухом вздовж осі надґратниці. Нехай $\Psi_\alpha(Q, \eta)$ — система власних функцій рівняння (30), які відповідають невідродженим власним значенням $E_\alpha(Q)$. Застосування стандартного квантово-механічного підходу уможливило показати, що ці функції ортогональні із вагою $D_0(\eta)$ і можуть бути нормованими. Це означає, що має місце співвідношення:

$$\int \Psi_\beta^*(Q, \eta) D_0(\eta) \Psi_\alpha(Q, \eta) d\eta = \delta_{\alpha\beta}. \quad (31)$$

Ортонормованість системи розв'язків рівняння (30) уможливило записати розвинення в наступні ряди:

$$\Psi_{Q_0}(\eta) = \sum_\alpha C_\alpha \Psi_\alpha(Q, \eta), \quad (32)$$

$$\Psi_{Q_n}(\eta) = \sum_\alpha B_\alpha \Psi_\alpha(Q + g_n, \eta), \quad (33)$$

комбінуючи які із рівняннями (28), (29), після відповідних процедур проектування для коефіцієнтів розвинення одержується наступна система рівнянь:

$$[E - E_\alpha(Q)] C_\alpha + E \sum_\beta D_{-n\alpha\beta} B_\beta = 0, \quad (34)$$

$$[E - E_\beta(Q + g_n)] B_\beta + E \sum_\alpha D_{n\beta\alpha} C_\alpha = 0, \quad (35)$$

де

$$D_{n\beta\alpha} = \int D_n(\eta) \Psi_\beta^*(Q + g_n, \eta) \Psi_\alpha(Q, \eta) d\eta. \quad (36)$$

6. ХВИЛЬОВІ ФУНКЦІЇ В АДІЯБАТИЧНОМУ НАБЛИЖЕННІ

Якщо нехтувати переходами між станами з різними значеннями вектора оберненої ґратниці, то відповідні цьому адіабатичному наближенню хвильові функції є розв'язками рівняння (30). Але це рівняння містить у явній формі нульову Фур'є-амплітуду. В силу того, що спостережувані у більшості випадків кути розходження δ із значним запасом задовольняють умові $\delta \ll 1$, то при

обчисленнях Фур'є-амплітуди $D_n(\eta)$ виконуються з точністю до δ^2 включно. З цією метою у формулі (23) виділяються дійсна і уявна частини, в яких підінтегральні функції розвиваються в ряд за степенями параметра $\text{ch}^{-1}(\pi\eta/l)$, який менший, ніж одиниця. Подальше інтегрування простих підінтегральних функцій зі збереженням членів вказаного раніше основного порядку дає:

$$\text{Re } D_n(u) = \left(\frac{d}{l}\right)^2 (1 + 4\delta^2 u^2) \Delta_{n0}, \quad (37)$$

$$\text{Im } D_n(u) = -\left(\frac{d}{l}\right)^2 \frac{4\delta n}{(4n^2 - 1)\pi} u. \quad (38)$$

Тут Δ_{n0} — Кронекерів дельта-символ і, крім цього, прийнято позначення $u = \text{ch}^{-1}(\pi\eta/l)$.

Нульова Фур'є-амплітуда визначається співвідношенням (37), в якому слід вибрати значення $n = 0$. Після підстановки одержаного результату у рівняння (30) це рівняння приводиться до наступного вигляду:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \chi(Q, E) + \frac{4\delta^2 \chi(E)}{\text{ch}^2(\pi\eta/l)} \right] \Psi(\eta) = 0, \quad (39)$$

де введено позначення:

$$\chi(Q, E) = \frac{2mE}{\hbar^2} \left(\frac{d}{l}\right)^2 - Q^2, \quad \chi(E) = \frac{2mE}{\hbar^2} \left(\frac{d}{l}\right)^2. \quad (40)$$

Рівняння (31) за своєю структурою збігається з відомим хвильовим рівнянням [7] для модифікованого потенціалу Пешль–Теллера з тією істотною різницею, що визначальна для цього потенціалу координатна залежність $\text{ch}^{-2}(\pi\eta/l)$ у випадку рівняння (40) переносить на ефективну масу електрона, що принципово змінює зміст та інтерпретацію одержаних результатів.

Переходом до нової змінної y за формулою

$$y = \text{ch}^2(\pi\eta/l) \quad (41)$$

і до нової хвильової функції $\Phi(y)$, визначеної співвідношенням

$$\Phi(y) = y^{-\mu} \Psi(y), \quad (42)$$

в якому показник μ підбирається так, щоб виключити останній, тобто пропорційний y^{-1} , доданок у рівнянні (39), це рівняння набуває такої форми:

$$y(1-y)\Phi'' + [\mu + 1/2 - (\mu + 1)y]\Phi' - \left[\mu^2/4 + \left(\frac{l}{2\pi} \right)^2 \chi(Q, E) \right] \Phi = 0. \quad (43)$$

За вищесказаним, параметер μ є одним із розв'язків

$$\mu = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + \left(\frac{2\delta l}{\pi} \right)^2 \chi(E)} \quad (44)$$

квадратного рівняння

$$\mu^2 - \mu - 4\chi(E) \left(\frac{\delta l}{\pi} \right)^2 = 0. \quad (45)$$

Розв'язками рівняння (43) є Гауссові гіпергеометричні функції ${}_2F_1(\alpha, \beta; \gamma; z)$, в яких «верхній» параметер γ і «нижні» параметри α і β визначаються співвідношеннями:

$$\gamma = \mu + 1/2, \quad \alpha = \frac{\mu}{2} + i \frac{l}{2\pi} \sqrt{\chi(Q, E)}, \quad \beta = \frac{\mu}{2} - i \frac{l}{2\pi} \sqrt{\chi(Q, E)}. \quad (46)$$

Безпосередньою підстановкою можна переконатися, що після такого перепозначення рівняння (43) набуває вигляду, який відповідає гіпергеометричним функціям, а саме,

$$y(1-y)\Phi'' + [\gamma - (\alpha + \beta + 1)y]\Phi' - \alpha\beta\Phi = 0. \quad (47)$$

Загальний розв'язок одержаного рівняння зручно подати як лінійну комбінацію парної та непарної складових. Із врахуванням цього, а також відповідних замінів змінних можна записати загальний розв'язок рівняння Шредінґера (30):

$$\begin{aligned} \Psi(\eta) = & A \operatorname{ch}^\mu(\pi\eta/l) {}_2F_1\left[\alpha, \beta; 1/2; -\operatorname{sh}^2(\pi\eta/l)\right] + \\ & + B \operatorname{ch}^\mu(\pi\eta/l) \operatorname{sh}(\pi\eta/l) {}_2F_1\left[\gamma - \alpha, \gamma - \beta; 3/2; -\operatorname{sh}^2(\pi\eta/l)\right], \end{aligned} \quad (48)$$

де перший доданок є парною функцією, а другий — непарною.

7. НЕПЕРЕРВНИЙ СПЕКТЕР

Нижні параметри гіпергеометричних функцій, залежно від знаку $\chi(Q, E)$, можуть бути як комплексними, так і дійсними. Вони набувають комплексних значень, якщо для всіх енергій виконується умова $\chi(Q, E) > 0$. В основному порядку за малим параметром δ із співвідношень (44) і (46) при виконанні зазначеної умови впливає, що $\mu = 0, 1$, тоді як

$$\alpha = \beta^* = \begin{cases} \frac{i}{2\pi} l \sqrt{\chi(Q, E)}, & \mu = 0; \\ \frac{1}{2} + \frac{i}{2\pi} l \sqrt{\chi(Q, E)}, & \mu = 1. \end{cases} \quad (49)$$

При вказаних співвідношеннях між індексами гіпергеометричних функцій допускають вираження в термінах елементарних функцій. Зокрема, у першому випадку, тобто при $\mu = 0$, згідно з таблицями з [20], мають місце вирази:

$${}_2F_1(1/2 + \alpha, 1/2 - \alpha; 3/2; z) = \frac{-\pi}{\text{lsh}(\pi\eta/l)} \sin \left[2i \frac{il \sqrt{\chi(Q, E)}}{2\pi} \arcsin \left(\text{ish} \frac{\pi\eta}{l} \right) \right]$$

і ${}_2F_1(\alpha, -\alpha; 1/2; z) = \cos \left[2i \frac{il \sqrt{\chi(Q, E)}}{2\pi} \arcsin \left(\text{ish} \frac{\pi\eta}{l} \right) \right]$, після спрощення яких можна одержати:

$$\begin{aligned} {}_2F_1(1/2 + \alpha, 1/2 - \alpha; 3/2; z) &= \frac{-\pi}{\text{lsh}(\pi\eta/l)} \sin \left[\eta \sqrt{\chi(Q, E)} \right], \\ {}_2F_1(\alpha, -\alpha; 1/2; z) &= \cos \left[\eta \sqrt{\chi(Q, E)} \right]. \end{aligned} \quad (50)$$

Підстановка останніх співвідношень у загальний вираз (48) показує, що хвильова функція у основному порядку за малим параметром зводиться до лінійної комбінації пласких хвиль, що відповідає квазивільному руху у напрямку, перпендикулярному до оптичної площини віцинальної структури. Використовуючи аналогічні перетворення, можна показати, що зроблений висновок залишається справедливим і при $\mu = 1$.

Оскільки, за виключенням знаку, відсутні які б то не були обмеження на $\chi(Q, E)$, то $\sqrt{\chi(Q, E)}$ набуває змісту хвильового числа, позначеного як k , тобто

$$\sqrt{\chi(Q, E)} = k. \quad (51)$$

Таким чином, квантові числа α і β ідентифікуються, як це хвильове число k .

Комбінуючи (40) і (51), можна одержати наступний вираз для енергетичного спектру електронів у адіабатичному наближенні:

$$E_k(Q) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{l}{d} \right)^2 (k^2 + Q^2) = E(k) + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{l}{d} \right)^2 Q^2,$$

який у схемі приведених Бріллуєнових зон має наступний ви-

гляд:

$$E_{k'}(Q + g_n) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{l}{d} \right)^2 \left[k^2 + (Q + g_n)^2 \right]. \quad (52)$$

З наближенням до межі Бріллюєнової зони внаслідок Бреґґового розсіяння для одержання закону дисперсії слід повернутися до системи рівнянь (34), (35). Враховуючи вертикальні переходи, тобто такі, для яких $\alpha = \beta = k$, система (34), (35) набуває форми:

$$[E - E_k(Q)]C_k + ED_{-nk}B_k = 0, \quad (53)$$

$$[E - E_k(Q + g_n)]B_k + ED_{nk}C_k = 0, \quad (54)$$

властивої для теорії збурення двох вироджених рівнів з тією різницею, що недіагональний елемент у явній формі залежить від енергії. Власні значення енергії одержуються з умови існування нетривіального розв'язку системи і виражаються співвідношеннями:

$$E_{1,2k}(Q) = \left\{ \frac{1}{2} [E_k(Q) + E_k(Q + g_n)] \pm \sqrt{[E_k(Q) - E_k(Q + g_n)]^2 + 4E_k(Q)E_k(Q + g_n)|D_{nk}|^2} \right\} (1 - |D_{nk}|^2)^{-1}. \quad (55)$$

Як і слід було сподіватися, на межах Бріллюєнових зон має місце характерне для надґратниць розщеплення закону дисперсії в енергетичні зони. Одержаний висновок збігається з результатами багатьох авторів [1, 6, 8]. Тим не менше, є суттєва різниця у механізмі виникнення надґратницевих підзон. Авторами згаданих робіт розглядалися модельні потенціали типу потенціалу Кроніґа–Пенні чи «Діракового» гребінця, тоді як у моделю, який досліджується у даній роботі, розщеплення на підзони має в своїй основі суто геометричну природу і пов'язане з чинником форми. Таким чином, формування системи дозволених і заборонених зон зумовлене геометричним потенціалом і відбиває факт двовимірного конфайнменту електронів в області терас.

Ширина E_{gn} заборонених зон знаходиться як різниця енергій у точці $Q = -g_n/2$ і виражається формулою

$$E_{gn} = \frac{2E_k(g_n/2)|D_{nk}|}{1 - |D_{nk}|^2}, \quad (56)$$

в якій фактор $|D_{nk}|$ обчислюється за означенням (36) і при виборі нормованих функцій зі структурою, яку подано співвідношеннями (50), матиме наступний вигляд:

$$|D_{nk}| = \left(\frac{d}{l}\right)^2 \frac{4\delta l}{\pi^2} \frac{n}{4n^2 - 1}. \quad (57)$$

Одержаний результат (57) показує, що енергетичні щілини в спектрі надгратниці, на відміну від закону дисперсії у віддалених точках Бріллюєнової зони, лінійно залежать від кута розходження, зменшуючись пропорційно $1/n$ зі зростанням порядкового номера зони.

8. ЛОКАЛІЗОВАНІ СТАНИ

Як показано у вищеописаному розгляді, при $\chi(Q, E) > 0$ хвильова функція по мірі віддалення від віцинальної грані, тобто при $\eta \gg l$, демонструє асимптотику, яка відповідає пласкій хвилі. У протилежному випадку, коли

$$\chi(Q, E) = -\kappa^2 < 0, \quad (58)$$

характер фундаментальних розв'язків рівняння (30) радикально змінюється. У відповідності з асимптотиками, поданими у довіднику [22], для непарної Ψ_{odd} і парної Ψ_{ev} компонент хвильової функції після підстановки першого та двох інших параметрів (46) з врахуванням (58) впливають співвідношення:

$$\begin{aligned} \Psi_{odd}(\eta) \simeq & BC \operatorname{th}^\mu(\pi\eta/l) \Gamma(3/2) \times \\ & \times \left[\frac{\Gamma(l\kappa/\pi)}{\Gamma(\mu/2 + 1/2 - l\kappa/2\pi) \Gamma(1 - \mu/2 - l\kappa/2\pi) [\operatorname{sh}(\pi\eta/l)]^{l\kappa/\pi}} + \right. \\ & \left. + \frac{\Gamma(-l\kappa/\pi) [\operatorname{sh}(\pi\eta/l)]^{l\kappa/\pi}}{\Gamma(\mu/2 + 1/2 + l\kappa/2\pi) \Gamma(1 - \mu/2 + l\kappa/2\pi)} \right], \quad (59) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{ev}(\eta) \simeq & A \operatorname{ch}^\mu(\pi\eta/l) \frac{\Gamma(1/2) \Gamma(l\kappa/\pi) [\operatorname{sh}(\pi\eta/l)]^{-\mu+l\kappa/\pi}}{\Gamma(\mu/2 + l\kappa/2\pi) \Gamma(1/2 - \mu/2 + l\kappa/2\pi)} + \\ & + A \operatorname{ch}^\mu(\pi\eta/l) \frac{\Gamma(1/2) \Gamma(-l\kappa/\pi) [\operatorname{sh}(\pi\eta/l)]^{\mu-l\kappa/\pi}}{\Gamma(\mu/2 - l\kappa/2\pi) \Gamma(1/2 - \mu/2 - l\kappa/\pi)}. \quad (60) \end{aligned}$$

Кожна із функцій (59), (60) має сингулярний характер, експоненційно розбігаючись при $\eta \rightarrow \infty$. Сингулярні доданки усуваються, і як парний, так і непарний розв'язки залишаються скінченними при $\eta \rightarrow \infty$, якщо гама-функції у знаменниках коефіцієнтів сингулярних членів дорівнюватимуть $-m$, де m — ціле число або нуль. Гама-функція цілого від'ємного аргументу має полюс, що забезпечує виключення сингулярних членів із асимптоти

(59) і (60).

Зазначені вимоги приводять до наступної сукупності рівнянь:

$$1 - \mu/2 + l\kappa/2\pi = -m \quad (61)$$

або

$$1/2 + \mu/2 + l\kappa/2\pi = -m \quad (62)$$

— для непарної функції та

$$\mu/2 + l\kappa/2\pi = -m \quad (63)$$

або

$$1/2 - \mu/2 + l\kappa/2\pi = -m \quad (64)$$

— для симетричної функції.

Аналіза показує, що при $\mu \in [0, 1]$ жодне із рівнянь сукупності (61)–(64) розв'язків немає. Важливо, що кінцеві точки цього інтервалу відповідають ідеальній пласкій поверхні, і відсутність зв'язаних станів цілком узгоджується із раніше зробленим для цього випадку висновком щодо поведінки хвильової функції, яка точно збігається з пласкою хвилею. В інтервалі $\mu \in [-0,5, 0]$ лише рівняння (63) може мати розв'язки. Якщо $\mu \in (-\infty, -0,5]$, то до нього приєднується також рівняння (62). Розглядаючи додатні значення μ , можна переконатися, що для $\mu \in (1, 2)$ розв'язок може мати тільки рівняння (64), а при $\mu \in [2, \infty)$, крім цього, ще можуть існувати розв'язки рівняння (61).

Введемо позначення:

$$\tilde{Q} = lQ/\pi, \quad \tilde{\kappa} = l\kappa/\pi. \quad (65)$$

Після цього рівняння (61)–(64) зводяться до наступного вигляду:

$$\sqrt{1/4 + 4\delta^2 (\tilde{Q}^2 - \tilde{\kappa}^2)} = (p + 1/2) + \tilde{\kappa}. \quad (66)$$

Тут парні значення p відповідають симетричним, а непарні — антисиметричним хвильовим функціям. Для половини першої Бріллуєнної зони $0 \leq \tilde{Q} < 1$; для половин наступних зон $n - 1 \leq \tilde{Q} < n$.

Розв'язавши рівняння (66), знайдемо

$$\tilde{\kappa}_p = \left[\sqrt{1/4 + 4\delta^2 \tilde{Q}^2 (1 + 4\delta^2) - 4\delta^2 p(p + 1) - (p + 1/2)} \right] (1 + 4\delta^2)^{-1}, \quad (67)$$

причому відбираються лише ті розв'язки, для яких $\tilde{\kappa}_p > 0$ і які узгоджуються з незбуреним випадком при $\delta = 0$. Зокрема, для першої Бріллюєнової зони слід покласти $p = 0$, і відповідний розв'язок визначатиметься співвідношенням:

$$\tilde{\kappa}_0 = \left[\sqrt{1/4 + 4\delta^2 \tilde{Q}^2 (1 + 4\delta^2)} - 1/2 \right] (1 + 4\delta^2)^{-1}. \quad (68)$$

Умова $\tilde{\kappa}_p > 0$ виконується для таких значень безрозмірного хвильового вектора Q , за яких

$$\tilde{Q} > \frac{\sqrt{p(p+1)}}{2\delta}. \quad (69)$$

Цим співвідношенням встановлюється зв'язок між квантовим числом p і номером n Бріллюєнової зони, а саме,

$$n = 1 + \left\lceil \frac{\sqrt{p(p+1)}}{2\delta} \right\rceil; \quad (70)$$

тут $[x]$ — ціла частина числа x .

Взявши до уваги попередні означення, для енергетичного спектру одержуємо:

$$E_p(Q) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \left[\tilde{Q}^2 - \tilde{\kappa}_p^2 \right], \quad (71)$$

Наведені викладки можна повторити для кожної із Бріллюєнових зон. Для одержання аналітичного результату у співвідношеннях (71) і (68) замість Q слід підставити значення $Q + g_n$.

Таким чином, електронний спектр має наступну структуру.

При $\chi(Q + g_n, E) = q^2 > 0$ хвильова функція, залежно від координати \hbar , має осцилюючий характер з хвильовим числом q . Відповідна хвильова функція у границі $\delta \rightarrow 0$ переходить у пласку хвилю. Періодичність вздовж віцинальної поверхні приводить до того, що рух вздовж ребер віцинальних кутів і у напрямку, перпендикулярному до поверхні, описується параболічним законом дисперсії; рух у напрямку, перпендикулярному до ребра віцинального кута, відповідає мінізонам; так, для енергії матимемо:

$$E_n(k, Q, q) = E_c + \frac{\hbar^2 (k^2 + q^2)}{2m} + \frac{\hbar^2 (Q + g_n)^2}{2md^2}, \quad (72)$$

причому тут Q змінюється у першій Бріллюєновій зоні.

Якщо $\chi(Q + g_n, E) = -\kappa^2 < 0$, то при фіксованому значенні кута розходження, тобто параметра δ , для кожного цілого p за формулою (70) знаходиться Бріллюєнова зона, в якій від тривимірного

спектру з надґратницею, який описується формулою (70), відщеплюється двовимірна мінізона зі спектром, який описується рівнянням

$$E_p(k, Q) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \pi^2}{2md^2} \left[(\tilde{Q} + \tilde{g}_n)^2 - \tilde{\kappa}_p^2 (\tilde{Q} + \tilde{g}_n) \right] \quad (73)$$

Відповідна хвильова функція, осцилюючи, експоненційно згасає усередину кристалу.

9. ВИСНОВКИ

Показано, що для дослідження електронного спектру віцинальної поверхні з періодичним масивом сходинок ефективною є метода конформних перетворень, яка уможливорює перенести збурення, викликане наявністю поверхні, в Гамільтонів оператор, забезпечивши розділення змінних у крайових умовах, які накладаються на хвильову функцію.

Для широкого класу віцинальних поверхонь металів, наприклад Au, Cu, кут неузгодженості між терасою й оптичною поверхнею, як правило, настільки малий, що в метричному тензорі і в його визначнику, тобто Якобіані переходу, можна обмежитися членами основного порядку за кутом розходження. В такому наближенні одержано закон дисперсії, типовий для структур з надґратницями. Електронний спектр складається з мінізон, які відповідають делокалізованим станам, і є наслідком періодичності масиву сходинок. Крім цього, спостерігається відщеплення мінізон, яким відповідають хвильові функції, локалізовані біля поверхні.

Встановлена енергетична зонна структура спектру не пов'язана із припущеннями модельного характеру щодо атомового потенціалу на поверхні, а формується за рахунок чинників чисто геометричної природи, в чому має певну аналогію із Таммовими поверхневими станами.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. A. Mugarza, F. Shiller, J. Kuntze, J. Cordyn, M. Ruiz-Osés, and J. E. Ortega, *J. Phys. Condens. Matter*, **18**: S27 (2006); doi: <https://doi.org/10.1088/0953-8994/18/13/S03>
2. Г. В. Бенеманская, П. А. Дементьев, С. А. Кукушкин, М. Н. Лапукин, А. В. Осипов, С. Н. Тимошина, *Письма в ЖТФ*, **42**, № 42: 51 (2016); doi: 10.21883/pjtf.2016.23.43982.16389.
3. А. А. Кордюк, *Физика низких температур*, **40**, № 4: 375 (2014); doi: <https://doi.org/10.1063/1.4871745>.

4. Д. Ю. Усачов, А. М. Шикин, А. Ю. Варыхалов, В. К. Адамчук, А. Радер, *Физика твердого тела*, **49**, № 5: 899 (2007).
5. A. M. Shikin, A. Varykhalov, S. A. Gorovikov, G. V. Prudnikova, V. K. Adamchuk, K.-H. Rieder, W. Guadat, and O. Rader, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **144–147**: 625 (2005).
6. A. Mugarza and J. E. Ortega, *J. Phys. Condens. Matter*, **15**: S3281 (2003); doi: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/47/006>.
7. S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics I* (Berlin–Heidelberg–New–York: Springer-Verlag: 1971).
8. J. Lobo, E. G. Michel, A. R. Bachmann, S. Speller, L. Roca, J. Kuntze, and J. E. Ortega, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A21**, No. 4: 1194 (2003); doi: <https://doi.org/10.1116/1.1599894>.
9. B. Obreshkov and Th. Uwe, *Phys. Rev. A*, **74**: 012901-10 (2006); doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.012901>.
10. Jin-Nam Yeo, Lan-Hee Yang, and B. D. Yu, *Journal of the Korean Physical Society*, **54**, No. 1: 115 (2009); doi: <https://doi.org/10.3938/jkps.54.115>.
11. C. Barreateau, F. Raouafi, M. C. Desjonquères, and D. Spanjaard, *ccsd-00002151, version 1 - 25 Jun 2004*, 34 p.; doi: <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00002151>.
12. M. Roth, M. Pickel, J. Wang, M. Weinelt, Th. Fayster, *Appl. Phys.*, **B74**: 661 (2002); doi: [10.1007/s00340-002-0919-3](https://doi.org/10.1007/s00340-002-0919-3).
13. B. A. Stickler, U. Even, and K. Hornberger, *arXiv:1410.7243v1, [quant-physics]*, 27 October 2014; doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.91.013614>.
14. Л. И. Магарилл, А. В. Чаплик, М. В. Энтин, *Успехи физических наук*, **175**, № 9: 95 (2005).
15. D. J. Ben Daniel and C. B. Duke, *Phys. Rev.*, **152**: 683 (1966); doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.152.683>.
16. O. Von Roos, *Phys. Rev. B*, **27**: 7547 (1983); doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.7547/>.
17. O. Von Roos and H. Mavromatis, *Phys. Rev. B*, **31**: 2294 (1985); doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.2294>.
18. R. Koç and S. Saym, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **43**: 455203 (2010); doi: <https://doi.org/10.1002/andp.20030031>.
19. М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат, *Методы теории функций комплексной переменной* (Москва: Наука: 1987).
20. А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев, *Интегралы и ряды: дополнительные главы* (Москва: Наука: 1986).
21. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables* (Eds. M. Abramowitz and I. A. Stegun), Nat'l Bureau of Standards. Appl. Math. Ser. Vol. **55** (Washington, D.C.: U.S. Govt. Printing Office: 1964).
22. N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (New York–Chicago–San Francisco–Atlanta–Dallas–Montreal–Toronto–London–Sydney: Holt, Rinehart and Winston: 1976).

REFERENCES

1. A. Mugarza, F. Shiller, J. Kuntze, J. Cordyn, M. Ruiz-Osés, and J. E. Ortega, *J. Phys. Condens. Matter*, **18**: S27 (2006);

- doi: <https://doi.org/10.1088/0953-8994/18/13/S03>
2. G. V. Benemanskaya, P. A. Dement'ev, S. A. Kukushkin, M. N. Lapukin, A. V. Osipov, and S. N. Timoshina, *Pis'ma v ZhTF*, **42**, No. 42: 51 (2016); doi: [10.21883/pjtf.2016.23.43982.16389](https://doi.org/10.21883/pjtf.2016.23.43982.16389).
 3. A. A. Kordyuk, *Fizika Nizkikh Temperatur*, **40**, No. 4: 375 (2014); doi: <https://doi.org/10.1063/1.4871745>.
 4. D. Yu. Usachov, A. M. Shikin, A. Yu. Varykhalov, V. K. Adamchuk, and A. Rader, *Fizika Tverdogo Tela*, **49**, No 5: 899 (2007).
 5. A. M. Shikin, A. Varykhalov, S. A. Gorovikov, G. V. Prudnikova, V. K. Adamchuk, K.-H. Rieder, W. Guadat, and O. Rader, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **144–147**: 625 (2005).
 6. A. Mugarza and J. E. Ortega, *J. Phys. Condens. Matter*, **15**: S3281 (2003); doi: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/47/006>.
 7. S. Flügge, *Practical Quantum Mechanics I* (Berlin–Heidelberg–New–York: Springer-Verlag: 1971).
 8. J. Lobo, E. G. Michel, A. R. Bachmann, S. Speller, L. Roca, J. Kuntze, and J. E. Ortega, *J. Vac. Sci. Technol.*, **A21**, No. 4: 1194 (2003); doi: <https://doi.org/10.1116/1.1599894>.
 9. B. Obreshkov and Th. Uwe, *Phys. Rev. A*, **74**: 012901-10 (2006); doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.74.012901>.
 10. Jin-Nam Yeo, Lan-Hee Yang, and B. D. Yu, *Journal of the Korean Physical Society*, **54**, No. 1: 115 (2009); doi: <https://doi.org/10.3938/jkps.54.115>.
 11. C. Barreateau, F. Raouafi, M. C. Desjonquères, and D. Spanjaard, *csd-00002151, version 1 - 25 Jun 2004*, 34 p.; doi: <https://hal.archives-ouvertes.fr/hal-00002151>.
 12. M. Roth, M. Pickel, J. Wang, M. Weinelt, Th. Fayster, *Appl. Phys.*, **B74**: 661 (2002); doi: [10.1007/s00340-002-0919-3](https://doi.org/10.1007/s00340-002-0919-3).
 13. B. A. Stickler, U. Even, and K. Hornberger, *arXiv:1410.7243v1, [quant-physics]*, 27 October 2014; doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.91.013614>.
 14. L. I. Magarill, A. V. Chaplik, and M. V. Jentin, *Uspekhi Fizicheskikh Nauk*, **175**, No. 9: 95 (2005).
 15. D. J. Ben Daniel and C. B. Duke, *Phys. Rev.*, **152**: 683 (1966); doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRev.152.683>.
 16. O. Von Roos, *Phys. Rev. B*, **27**: 7547 (1983); doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.27.7547>.
 17. O. Von Roos and H. Mavromatis, *Phys. Rev. B*, **31**: 2294 (1985); doi: <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.31.2294>.
 18. R. Koç and S. Saym, *J. Phys. A: Math. Theor.*, **43**: 455203 (2010); doi: <https://doi.org/10.1002/andp.20030031>.
 19. M. A. Lavrentiev and B. V. Shabat, *Metody Teorii Funktsiy Kompleksnoy Peremennoy* (Moscow: Nauka: 1987).
 20. A. P. Prudnikov, Yu. A. Brychkov, and O. I. Marichev, *Integraly i Ryady: Dopolnitel'nyye Glavy* (Moscow: Nauka: 1986).
 21. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs and Mathematical Tables* (Eds. M. Abramowitz and I. A. Stegun), Nat'l Bureau of Standards. Appl. Math. Ser. Vol. **55** (Washington, D.C.: U.S. Govt. Printing Office: 1964).
 22. N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics* (New York–Chicago–San Francisco–Atlanta–Dallas–Montreal–Toronto–London–Sydney: Holt, Rinehart and Winston: 1976).

*Vinnytsia National Technical University,
95 Khmelnytske Shosse Str.,
21021 Vinnytsia, Ukraine*

¹ **Fig. 1.** The sketch of the crystal cross section by the plane perpendicular to the vicinal surface.

² **Fig. 2.** The image of unit cell in the complex semi-plane Z .

³ **Fig. 3.** The image of unit cell in the complex semi-plane ζ .

⁴ **TABLE.** Correspondence of points with the conform mapping.