

## Простые модели латеральных гетероструктур

© С.Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,  
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: Sergei\_Davydov@mail.ru

(Поступила в Редакцию 18 января 2018 г.)

Методом функций Грина в приближении сильной связи получены общие аналитические выражения для плотностей состояний латеральной гетероструктуры, образованной контактом двух квадратных полубесконечных решеток с однозонным и двухзонным спектрами. Для численных оценок использована полуэллиптическая плотность состояний, а для оценки перехода заряда предложена модель двух взаимодействующих димеров. Обсуждается применение настоящего подхода к описанию латеральных эпитаксиальных и графеноподобных гетероструктур.

DOI: 10.21883/FTT.2018.07.46129.015

### 1. Введение

Теоретическое исследование гетероструктур (ГС) на основе комбинаций химически различных двумерных (2D) графеноподобных соединений представляет непосредственный интерес для создания приборов нанoeлектроники. В большинстве случаев речь идет о вертикальных структурах, когда 2D слои располагаются параллельно друг другу вдоль оси  $z$ , перпендикулярной к их плоскостям [1–4]. Такие структуры называют ван-дер-ваальсовыми, так как слои связаны дисперсионными силами. В меньшей степени внимание уделяется латеральным структурам, образованным состыкованными по кромкам 2D-слоями, расположенными в одной плоскости [3,5,6]. Отметим, что наиболее популярны ГС, где компонентами является графен и гексагональный нитрид бора ( $h$ -BN), причем как для вертикального [4,7,8], так и для латерального [6,9,10] вариантов.

В настоящей работе мы предложим схему описания электронной структуры латеральных ГС, основанную на методе функций Грина и теории сильной связи. При этом для простоты будут рассмотрены модели контактов одноатомных и двухатомных квадратных решеток с одинаковыми расстояниями между ближайшими соседями (б.с.), чтобы избежать усложнений, связанных со структурным рассогласованием.

### 2. Полубесконечные 2D-решетки: метод Калкстейна—Совена

Рассмотрим бесконечную одноатомную квадратную решетку, расположенную в плоскости  $(x, y)$ , с расстоянием  $a$  между б.с. и законом дисперсии электронов  $\varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon - 2t[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]$ , где  $\varepsilon$  — энергия атомной  $s$ -орбитали,  $t$  — энергия перехода электрона между б.с.,  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  — волновой вектор. Функция

Грина такой решетки имеет вид:

$$G_0(\omega, \mathbf{k}) = \frac{g(\omega)}{1 + 2tg(\omega)[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)]}. \quad (1)$$

Здесь  $g^{-1}(\omega) = \omega - \varepsilon + is$  — одноатомная функция Грина,  $\omega$  — энергетическая переменная,  $s = 0^+$  [11,12]. Такая одноатомная решетка представляет собой простейшую модель 2D-металла.

Аналогично, для бесконечной двухатомной квадратной решетки, состоящей из атомов  $A$  и  $B$ , находящихся на расстоянии  $a$  друг от друга, имеем  $\varepsilon_{\pm}(\mathbf{k}) = \bar{\varepsilon} \pm \sqrt{\Delta^2 + 4t^2[\cos^2(k_x a) + \cos^2(k_y a)]}$ , где  $\bar{\varepsilon} = (\varepsilon_A + \varepsilon_B)/2$ ,  $\Delta = (\varepsilon_A - \varepsilon_B)/2$ . Соответствующая функция Грина есть

$$G_0^{A(B)}(\omega, \mathbf{k}) = \frac{g_{A(B)}(\omega)}{1 - 4g_A(\omega)g_B(\omega)t^2[\cos^2(k_x a) + \cos^2(k_y a)]}, \quad (2)$$

где  $g_{A(B)}^{-1}(\omega) = \omega - \varepsilon_{A(B)} + is$ ,  $\varepsilon_{A(B)}$  — энергия  $s$ -орбитали атома  $A(B)$  [11,12]. Такая двухатомная решетка является простейшей моделью 2D-полупроводника с шириной запрещенной зоны  $E_g = 2|\Delta|$ .

Для перехода к полубесконечным решеткам, что необходимо для нахождения соответствующих функций Грина  $G$  и  $G^{A(B)}$ , воспользуемся подходом Калкстейна и Совена [13]. Пусть бесконечной решетке отвечает гамильтониан  $H_0$ , а полубесконечной — гамильтониан  $H = H_0 + T$ , где  $T$  — возмущение, описывающее разрезание (разрыв межатомных связей) бесконечной решетки, в результате чего возникают левая ( $L$ ) и правая ( $R$ ) полубесконечные решетки. Обозначая через  $|\mathbf{R}\rangle$  локализованную на узле решетки  $\mathbf{R} = (x, y)$  функцию Ванье, можно записать

$$\langle \mathbf{R}|T|\mathbf{R}'\rangle = -\langle \mathbf{R}|H_0|\mathbf{R}'\rangle, \quad (3)$$

где  $|\mathbf{R}\rangle \in R$ ,  $|\mathbf{R}'\rangle \in L$ . Соотношение (3) следует из того простого факта, что после разрезания правая и левая

половины исходной решетки не связаны между собой, т.е.  $\langle \mathbf{R} | H | \mathbf{R}' \rangle = 0$ .

Будем считать, что ось  $x$  перпендикулярна, а ось  $y$  параллельна разрезу. Тогда для бесконечной одноатомной решетки справедливы трансляционные соотношения вида  $\langle m, k_y | G_0 | n, k'_y \rangle = \delta(k_y - k'_y) G_0(\omega, m - n, k_y)$ ,  $\langle m, k_y | G | n, k'_y \rangle = \delta(k_y - k'_y) G(\omega, m, n, k_y)$  и  $\langle m, k_y | T | n, k'_y \rangle = \delta(k_y - k'_y) T(m, n)$ , где  $m(n)$  — номера атомных рядов, так что  $x_{m(n)} = ta(na)$ . Для двухатомной решетки можно записать аналогичные соотношения, заменив  $ta(na)$  на  $2ma(2na)$ . Считаем, что  $m \geq 0$  соответствуют области  $R$ ,  $m \leq -1$  отвечает области  $L$ . При этом отличными от нуля являются только матричные элементы  $T(-1, 0)$  и  $T(0, -1)$ , равные по модулю  $t^1$ .

Начнем с одноатомной решетки. Воспользовавшись уравнением Дайсона  $G = G_0 + G_0 T G$ , получим для функции Грина правой полубесконечной решетки ( $m \geq 0$ ) следующее выражение:

$$G(m, m) = G_0(0) + t G_0(m+1) G_0(-m) [1 - t G_0(1)]^{-1}. \quad (4)$$

На разрезе „поверхностная“ функция Грина (4) имеет вид

$$G(0, 0) = \frac{G_0(0)}{1 - t G_0(1)}. \quad (5)$$

Для левой полубесконечной решетки ( $m \leq -1$ ) вместо выражений (4) и (5) получим соответственно

$$G(m, m) = G_0(0) + t G_0(-m-1) G_0(m) [1 - t G_0(-1)]^{-1}, \quad (6)$$

$$G(-1, -1) = \frac{G_0(0)}{1 - t G_0(-1)}. \quad (7)$$

В формулах (4)–(7) в аргументах функций Грина опущены переменные  $\omega$  и  $k_y$ .

Воспользовавшись результатами п.1 Приложения, для случая  $\alpha^2 = 4t^2/W^2 < 1$ , где  $W = \Omega + 2t \cos(k_y a)$ ,  $\Omega = \omega - \varepsilon$  легко показать, что

$$G(-1, -1) = G(0, 0) \equiv G(\omega, k_y) = \frac{2}{W} \frac{1 - \sqrt{1 - \alpha^2}}{\alpha^2}, \quad (8)$$

или  $G(\omega, k_y) = (W - \sqrt{W^2 - 4t^2})/2t^2$ . Так как в этом случае функция Грина не содержит мнимой части, соответствующая плотность состояний  $\rho(\omega, k_y) = -\pi^{-1} \text{Im} G(\omega, k_y) = 0$ . При  $\alpha^2 > 1$  нужно заменить  $\sqrt{1 - \alpha^2}$  на  $i\sqrt{\alpha^2 - 1}$ . Отсюда следует, что  $G(\omega, k_y) = (W - i\sqrt{4t^2 - W^2})/2t^2$ . Тогда соответствующая плотность состояний  $\rho(\omega, k_y) = \sqrt{4t^2 - W^2}/2\pi t^2$ .

Перейдем теперь к случаю двухатомной квадратной решетки. Выражения для функций Грина  $G_0^{A(B)}(m)$  приведены в Приложении, п.1. Для „поверхностных“ функций Грина  $G_0^{A(B)}$  полубесконечных решеток справедливы

<sup>1</sup> Здесь мы не вводим в матричные элементы множители вида  $\exp(i\vartheta(k_y))$ , так как они не существенны для произведения  $T(-1, 0)T(0, -1) = t^2$ . Поэтому, не теряя общности, можно положить  $T(-1, 0) = T(0, -1) = t$ .

формулы (5), (7) и (8) с заменой  $G_0$ ,  $G$  и  $\alpha^2$  на  $G_0^{A(B)}$ ,  $G^{A(B)}$  и  $\beta^2$ .

### 3. Гетероконтакты: общие соотношения

3.1. Контакт одноатомных решеток. Начнем с простейшего случая ГС, образованной состыковкой двух полубесконечных одноатомных решеток: левой ( $L$ ) с  $m \leq -1$  и правой ( $R$ ) с  $m \geq 0$ , различающихся только значениями энергий атомных  $s$ -орбиталей, равными соответственно  $\varepsilon_L$  и  $\varepsilon_R$ . Эти решетки, характеризующиеся для простоты одинаковым расстоянием  $a$  между б.с., связаны между собой матричными элементами  $\tilde{T}(-1, 0) = \tilde{T}(0, -1) = \tilde{t}$ . Такая система моделирует контакт двух 2D-металлов. Ниже в функциях Грина мы опускаем аргументы  $\omega$  и  $k_y$ , знак „тильда“ относится к ГС.

Воспользовавшись уравнением Дайсона  $\tilde{G} = G + G\tilde{T}\tilde{G}$ , получим

$$\begin{aligned} \tilde{G}(-1, -1) &= G(-1, -1) + G(-1, -1)\tilde{T}(-1, 0)\tilde{G}(0, -1), \\ \tilde{G}(0, -1) &= G(0, 0)\tilde{T}(0, -1)\tilde{G}(-1, -1), \end{aligned} \quad (12)$$

откуда

$$\tilde{G}(-1, -1) = G(-1, -1)[1 - \tilde{t}^2 G(-1, -1)G(0, 0)]^{-1}. \quad (13)$$

Аналогичным образом найдем

$$\tilde{G}(0, 0) = G(0, 0)[1 - \tilde{t}^2 G(-1, -1)G(0, 0)]^{-1}. \quad (14)$$

Обозначив  $G(-1, -1) \equiv G_L$ ,  $G(0, 0) \equiv G_R$  и  $\tilde{G}(-1, -1) \equiv \tilde{G}_L$ ,  $\tilde{G}(0, 0) \equiv \tilde{G}_R$ , из выражений (13), (14) получим

$$\tilde{G}_{L(R)}(\Omega_{L(R)}) = \frac{G_{L(R)}(\Omega_{L(R)})}{1 - \tilde{t}^2 G_L(\Omega_L)G_R(\Omega_R)}, \quad (15)$$

где  $\Omega_{L(R)} = \omega - \varepsilon_{L(R)}$ . Положим  $(1 - \tilde{t}^2 G_L G_R)^{-1} \equiv C = (G_+ + G_-)/2$ , где  $G_{\pm}^{-1} = 1 \pm \tilde{t}\sqrt{G_L G_R}$ . Переходя в случае  $W_{L(R)}^2 \leq 4t^2$  к комплексному представлению функций Грина  $G_{L(R)} = t^{-1} \exp(i\varphi_{L(R)})$ , где  $\varphi_{L(R)} = \text{Arctg}(-\sqrt{4t^2 - W_{L(R)}^2}/W_{L(R)})$  и  $W_{L(R)} = \Omega_{L(R)} + 2t \cos(k_y a)$ , получим

$$G_{\pm} = \frac{1 \pm \tau \cos \phi \mp i\tau \sin \phi}{1 \pm 2\tau \cos \phi + \tau^2}, \quad (16)$$

где безразмерная константа связи  $\tau = \tilde{t}/t$  и  $\phi = (\varphi_L + \varphi_R)/2$ . Плотности состояний, соответствующие функциям Грина (15), равны

$$\tilde{\rho}_{L(R)} = -(\pi t)^{-1} (\cos \varphi_{L(R)} \text{Im} C + \sin \varphi_{L(R)} \text{Re} C), \quad (17)$$

где  $\text{Re} C = (1 - \tau^2 \cos 2\phi)/A$ ,  $\text{Im} C = \tau^2 \sin 2\phi/A$  и  $A = 1 - 2\tau^2 \cos 2\phi + \tau^4$ . Легко показать, что при

$W_{L(R)}^2 \leq 4t^2$  имеем  $\sin \varphi_{L(R)} = -\sqrt{4t^2 - W_{L(R)}^2}/2t$  и  $\cos \varphi_{L(R)} = W_{L(R)}/2t$ . В случае  $W_{L(R)}^2 > 4t^2$  в формуле (17) и аналогичных выражениях, приведенных ниже, следует формально положить  $\sin \varphi_{L(R)} = 0$  и  $\cos \varphi_{L(R)} = (W_{L(R)} - \sqrt{W_{L(R)}^2 - 4t^2})/2t$ . Отметим, что условия  $W_{L(R)}^2 \leq 4t^2$  и  $W_{L(R)}^2 > 4t^2$  эквивалентны неравенствам  $|\Omega_{L(R)}| \leq 4L$  и  $|\Omega_{L(R)}| > 4t$ . Некоторые характерные частные случаи рассмотрены в Приложении, П2.

3.2. Контакт одноатомной и двухатомной решеток. Перейдем теперь к ГС, образованной состыковкой полубесконечных левой одноатомной ( $L, m \leq -1$ , энергия орбитали  $|s\rangle_L$  равна  $\varepsilon$ ) и правой двухатомной ( $R, m \geq 0$ , энергии орбиталей  $|s_A\rangle_R$  и  $|s_B\rangle_R$  равны соответственно  $\varepsilon_A$  и  $\varepsilon_B$ ) полубесконечных квадратных решеток, для которых расстояние между б.с. равно  $\alpha$ . Матричные элементы связи орбиталей  $|s\rangle_L$  и  $|s_{A(B)}\rangle_R$  равны  $\tilde{t}$ . Такая ГС моделирует контакт 2D-металла и полупроводника с шириной запрещенной зоны  $E_g = |\varepsilon_A - \varepsilon_B|$  (см. (2)).

Считая, что в узле 0 находится атом  $A(B)$ , можно повторить выкладки (12)–(14) и получить по аналогии с (15) четыре функции Грина вида

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{LA'(RA)}(\Omega_{L(RA)}) &= \frac{G_{L(RA)}(\Omega_{L(RA)})}{1 - \tilde{t}^2 G_L(\Omega_L) G_{RA}(\Omega_{RA})}, \\ \tilde{G}_{LB'(RB)}(\Omega_{L(RB)}) &= \frac{G_{L(RB)}(\Omega_{L(RB)})}{1 - \tilde{t}^2 G_L(\Omega_L) G_{RB}(\Omega_{RB})}, \end{aligned} \quad (18)$$

где  $\Omega_L = \omega - \varepsilon$ ,  $\Omega_{RA(B)} = \omega - \varepsilon_{A(B)}$ ; индекс  $LA'(B')$  у функций Грина  $\tilde{G}_{LA'(RA)}$  и  $\tilde{G}_{LB'(RB)}$  отвечает состоянию атома края  $L$ -решетки, взаимодействующего соответственно с атомами  $A$  и  $B$  края  $R$ -решетки. Таким образом, поставленная задача в нашей схеме сводится к двум независимым задачам о взаимодействии одноатомных полубесконечных решеток, рассмотренным в разделе 3.1, а именно: задаче об  $L$ -решетке, характеризуемой  $s$ -состоянием с энергией  $\varepsilon$ , связанной с  $R$ -решеткой, характеризуемой  $s$ -состояниями с энергиями  $\varepsilon_A$  и  $\varepsilon_B$ . Поэтому все полученные в 3.1 выражения справедливы, если заменить нижние индексы: у функции Грина  $\tilde{G}_L$  на  $LA'(RA)$  и  $LB'(RB)$ , у функции Грина  $\tilde{G}_R$  — на  $RA$  и  $RB$ , у энергетических параметров  $\Omega_R$  на  $\Omega_{RA}$ ,  $\Omega_{RB}$  и  $\varepsilon_R$  на  $\varepsilon_A$ ,  $\varepsilon_B$  соответственно. Положив  $\varepsilon_A + \varepsilon_B = 0$ , т.е. поместив начало отсчета энергии в середину запрещенной зоны 2D-полупроводника, и варьируя значение  $\varepsilon$ , получим различные варианты энергетической диаграммы системы. В соответствии с общим правилом  $\tilde{\rho}_{LA'(RA)} = \pi^{-1} \text{Im} \tilde{G}_{LA'(RA)}$  и  $\tilde{\rho}_{LB'(RB)} = \pi^{-1} \text{Im} \tilde{G}_{LB'(RB)}$ .

3.3. Контакт двухатомных решеток. Рассмотрим, наконец, контакт двухатомных полубесконечных решеток, правая из которых ( $R$ -решетка) по-прежнему характеризуется энергиями  $s$ -орбиталей  $\varepsilon_A$  и  $\varepsilon_B$  атомов  $A$  и  $B$  соответственно ( $E_{gR} = 2\Delta_R = |\varepsilon_A - \varepsilon_B|$ ), а левая ( $L$ -решетка) — энергиями  $\varepsilon_C$  и  $\varepsilon_D$ , отвечающими  $s$ -орбиталам атомов  $C$  и  $D$  ( $E_{gL} = 2\Delta_L = |\varepsilon_C - \varepsilon_D|$ ). Будем считать, что между собой связаны атомы  $A$

и  $C$ ,  $B$  и  $D$ , а матричные элементы связи равны  $\tilde{t}$ . Легко сообразить, что четыре соответствующих задаче функции Грина имеют вид

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{C(A)}(\Omega_{C(A)}) &= \frac{G_{C(A)}(\Omega_{C(A)})}{1 - \tilde{t}^2 G_C(\Omega_C) G_A(\Omega_A)}, \\ \tilde{G}_{D(B)}(\Omega_{D(B)}) &= \frac{G_{D(B)}(\Omega_{D(B)})}{1 - \tilde{t}^2 G_D(\Omega_D) G_B(\Omega_B)}, \end{aligned} \quad (19)$$

где  $\Omega_{C(D)} = \omega - \varepsilon_{C(D)}$ ,  $\Omega_{A(B)} = \omega - \varepsilon_{A(B)}$ . Такая ГС отвечает гетеропереходу на контакте двух полупроводников. Варьируя значения параметров  $\varepsilon_A$ ,  $\varepsilon_B$ ,  $\varepsilon_C$  и  $\varepsilon_D$ , можно получить 2D-аналоги объемных (см., например, [14]) и эпитаксиальных [15] ГС. Соответствующие плотности состояний равны  $\tilde{\rho}_{C(A)} = \pi^{-1} \text{Im} \tilde{G}_{C(A)}$  и  $\tilde{\rho}_{D(B)} = \pi^{-1} \text{Im} \tilde{G}_{D(B)}$ .

#### 4. Полуэллиптические плотности состояний: оценки

Все полученные выше функции Грина  $\tilde{G}$ ,  $G$  и плотности состояний  $\tilde{\rho}$ ,  $\rho$  зависят как от энергии  $\omega$ , так и от волнового вектора  $k_y$ . Для расчета электронного заполнения атомов  $m$ -го ряда атомов и перехода заряда между атомными рядами, параллельными линии контакта, необходимы зависящие только от энергии функции Грина  $\tilde{G}(\omega)$ ,  $G(\omega)$  и плотности состояний  $\tilde{\rho}(\omega)$ ,  $\rho(\omega)$ . Проинтегрировать точно выражение (8) по  $k_y$  не представляется, однако, возможным. Поэтому прибегнем к дальнейшим упрощениям и воспользуемся модельной полуэллиптической плотностью состояний, предложенной в [16] (см. также [17])

$$\begin{aligned} \rho(\Omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{Im} G(\Omega) \\ &= \frac{1}{4\pi t^2} \begin{cases} (16t^2 - \Omega^2), & |\Omega| \leq 4t, \\ 0, & |\Omega| > 4t, \end{cases} \end{aligned} \quad (20)$$

$$\text{Re} G(\Omega) = \frac{1}{4\pi t^2} \begin{cases} \Omega, & |\Omega| \leq 4t, \\ \Omega + (\Omega^2 - 16t^2)^{1/2}, & \Omega < -4t, \\ \Omega - (\Omega^2 - 16t^2)^{1/2}, & \Omega > -4t, \end{cases}$$

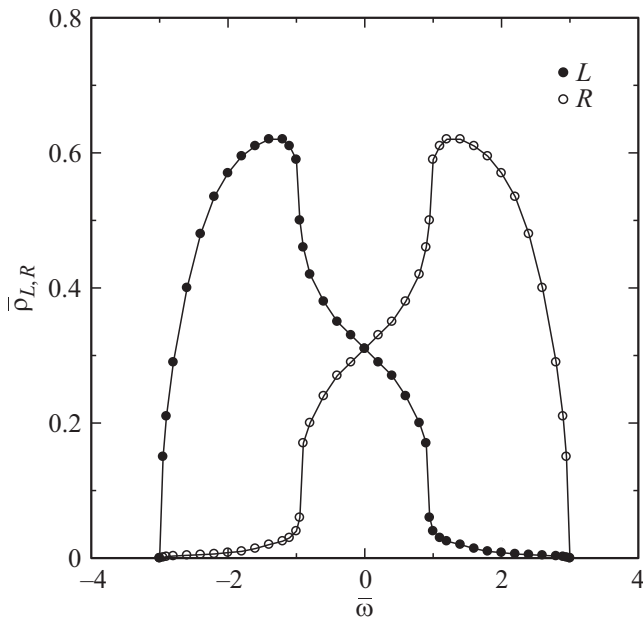
где  $\Omega = \omega - \varepsilon$ . По своей структуре выражения (20) и (21) относятся к одномерным структурам. 2D-характер этих выражений определяется тем, что сплошной спектр лежит в пределах  $|\Omega| \leq 4t$ , а не  $|\Omega| \leq 2t$  как в 1D-случае. Отметим, что  $\rho_{\max} = \rho(\Omega = 0) = (\pi t)^{-1}$  и  $|\text{Re} G|_{\max} = |\text{Re}(\Omega = \pm 4t)| = (\pi t)^{-1}$ .

Исходя из соотношений (15) для контакта двух одноатомных полубесконечных решеток, представим плотность состояний системы в виде

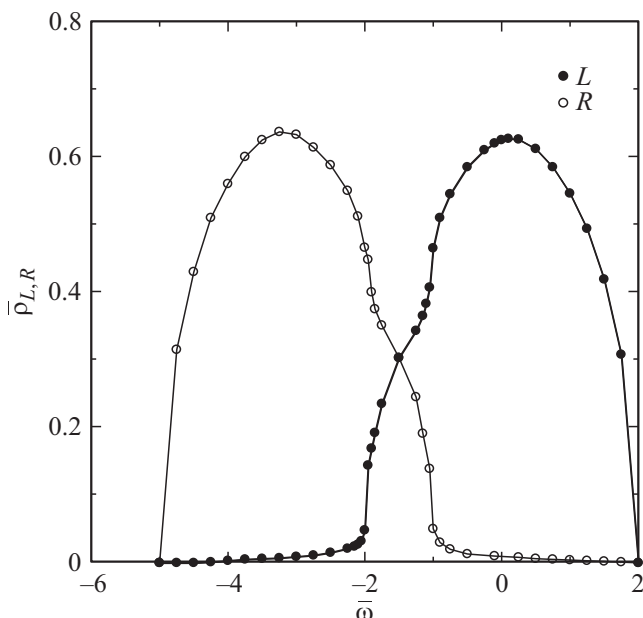
$$\tilde{\rho}_{L(R)} = -\frac{1}{\pi} \frac{\text{Re} G_{L(R)} \cdot [2] + \text{Im} G_{L(R)} \cdot [1]}{[1]^2 + [2]^2}, \quad (22)$$

где  $[1] = 1 - t^2(\text{Re} G_L \text{Re} G_R - \text{Im} G_L \text{Im} G_R)$ ,  $[2] = t^2 \times (\text{Re} G_L \text{Im} G_R - \text{Re} G_R \text{Im} G_L)$  и все входящие в (22) величины зависят только от энергии.

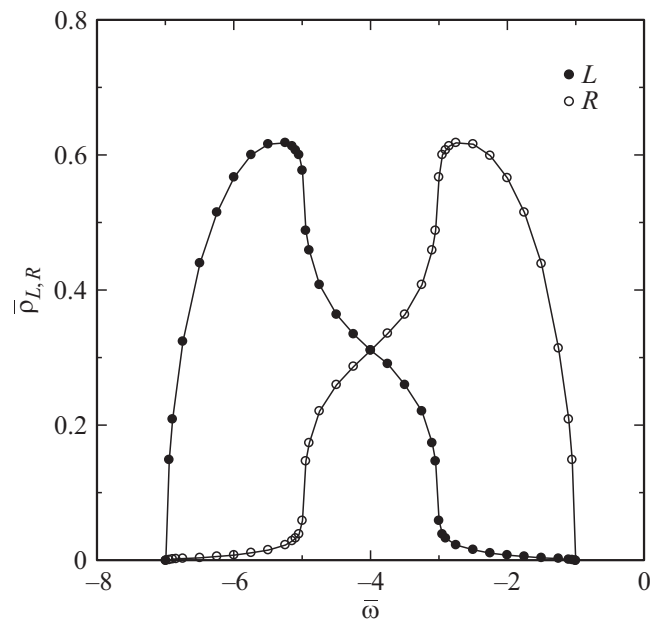
Для моделирования функции Грина и плотности состояний полубесконечной двухатомной решетки нужно преобразовать выражения (20) и (21), заменив в них  $\rho(\Omega)$  и  $\text{Re } G(\Omega)$  на  $\rho_{A(B)}(\Omega_{A(B)})$  и  $\text{Re } G_{A(B)}(\Omega_{A(B)})$ , где



**Рис. 1.** Контакт одноатомных полубесконечных 2D-решеток: приведенные плотности состояний  $\bar{\rho}_{L(R)} = \tilde{\rho}_{L(R)} \cdot 2t$  в функции от безразмерной энергии  $\bar{\omega} = \omega/2t$  при  $\bar{\varepsilon}_L = \varepsilon_L/2t = -1$  (центр зоны проводимости левой одноатомной решетки),  $\bar{\varepsilon}_R = \varepsilon_R/2t = 1$  (центр зоны проводимости правой одноатомной решетки) и  $\tau = \tilde{t}/t = 1$ .



**Рис. 2.** Контакт одноатомной и двухатомной полубесконечных 2D-решеток: приведенные плотности состояний  $\bar{\rho}_{L(R)} = \tilde{\rho}_{LA'(RA)} \cdot 2t$  в функции от безразмерной энергии  $\bar{\omega} = \omega/2t$  при  $\bar{\varepsilon}_L = \varphi_L/2t = 0$  (центр зоны проводимости левой одноатомной решетки),  $\bar{\varepsilon}_R = \varepsilon_A/2t = -3$  (центр валентной зоны правой двухатомной решетки) и  $\tau = \tilde{t}/t = 1$ .



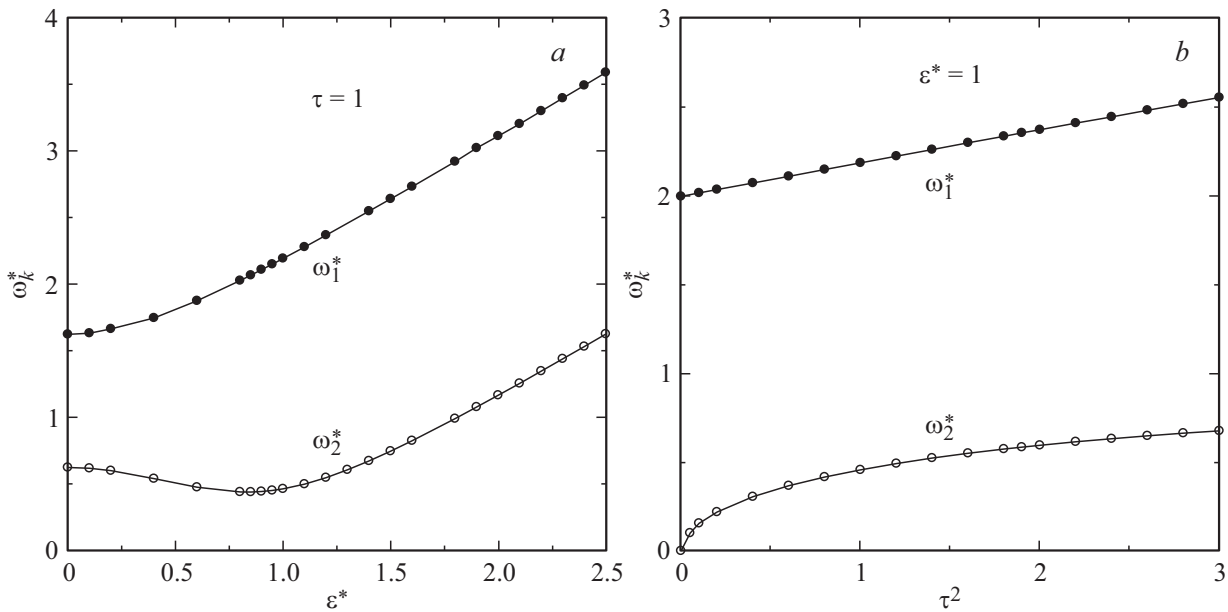
**Рис. 3.** Контакт двухатомных полубесконечных 2D-решеток: приведенные плотности состояний  $\bar{\rho}_{L(R)} = \tilde{\rho}_{L(R)} \cdot 2t$  в функции от безразмерной энергии  $\bar{\omega} = \omega/2t$  при  $\bar{\varepsilon}_L = \varepsilon_C/2t = -5$  (центр валентной зоны левой двухатомной решетки),  $\bar{\varepsilon}_R = \varepsilon_A/2t = -3$  (центр валентной зоны правой двухатомной решетки) и  $\tau = \tilde{t}/t = 1$ .

$\Omega_{A(B)} = \omega - \varepsilon_{A(B)}$ . При этом ширина запрещенной зоны равна  $E_g = \varepsilon_B - \varepsilon_A - 8t$  ( $\varepsilon_B > \varepsilon_A$ ). Затем для расчета следует воспользоваться формулами (18). Аналогичным образом для контакта двухатомных решеток в выражения (19) нужно ввести  $\rho_{A(B)}(\Omega_{A(B)})$ ,  $\text{Re } G_{A(B)}(\Omega_{A(B)})$  и  $\rho_{C(D)}(\Omega_{C(D)})$  и  $\text{Re } G_{C(D)}(\Omega_{C(D)})$ , где  $\Omega_{C(D)} = \omega - \varepsilon_{C(D)}$ , потребовав, чтобы  $E_{gL} = \varepsilon_D - \varepsilon_C - 8t > 0$  ( $\varepsilon_D > \varepsilon_C$ ) и  $E_{gR} = \varepsilon_B - \varepsilon_A - 8t > 0$  ( $\varepsilon_{A(B)} > \varepsilon_{C(D)}$ ). Подчеркнем, что в настоящей аппроксимации энергии  $\varepsilon_{A(B)}$  и  $\varepsilon_{C(D)}$  отвечают центрам валентных зон (зон проводимости), тогда как в формулах (2), (18), (19), (П3) и (П4) энергии  $\varepsilon_A$  и  $\varepsilon_B$  соответствуют краям этих зон.

Используя в качестве  $\text{Re } G_{L(R)}$  и  $\text{Im } G_{L(R)}$  выражения (20), (21), получим плотность состояний системы  $\tilde{\rho}_{L(R)}(\omega)$ , представленную на рис. 1–3 для рассмотренных выше ГС и достаточно общего случая перекрытия функций  $\rho_L(\omega)$  и  $\rho_R(\omega)$  по энергии<sup>2</sup>. При контакте одноатомных решеток (рис. 1) и выборе начала отсчета энергии в виде  $\varepsilon_L + \varepsilon_R = 0$  имеем симметричную относительно нуля энергии картину, моделирующую контакт 2D-металлов.

Плотности состояний для ГС, образованной контактом одноатомной и двухатомной решеток, представлены на рис. 2 для случая, когда зона проводимости одноатомной цепочки (2D-металла) полностью перекрывает

<sup>2</sup> Подчеркнем, что все полученные в п.3 формулы для функций Грина и плотностей состояний, зависящих от  $\omega, k_y$ , могут быть переписаны для функций Грина и плотностей состояний, зависящих только от  $\omega$



**Рис. 4.** Зависимость приведенных энергий уровней взаимодействующих димеров  $\omega_{1,2}^*$  от приведенной энергии  $\varepsilon^*$  при  $\tau = 1$  (a) и от квадрата безразмерной константы связи  $\tau^2$  при  $\varepsilon^* = 1$  (b).

запрещенную зону двухатомной решетки (2D-полупроводника). При этом в силу заданной нами симметрии ( $\varepsilon = \varepsilon_A + \varepsilon_B = 0$ ) на рис. 2 изображена только левая половина графика, относящаяся к валентной зоне двухатомной решетки. Правая половина графика представляет собой зеркальное отражение левой половины относительно нуля энергии.

Рис. 3 демонстрирует плотности состояний ГС, отвечающие контакту двухатомных решеток, моделирующему гетеропереход между двумя 2D-полупроводниками. Рассмотрен случай так называемого охватывающего (straddling) перехода [14,15] с совмещенными центрами запрещенных зон. Так же как и на рис. 2, изображена только левая половина симметричного относительно нуля энергии графика, относящаяся к валентным зонам. Запрещенная зона ГС совпадает с минимальной запрещенной зоной, соответствующей правой двухатомной решетке.

Сходство графиков на рис. 1–3 обусловлено тем обстоятельством, что во всех случаях рассматриваются, по сути, контакты двух „цепочек“, функции Грина которых описываются выражениями (20), (21). Отсюда же вытекают и особенности симметрии приведенных графиков.

### 5. Модель взаимодействующих димеров: переход заряда

Идя по пути дальнейшего упрощения задачи, рассмотрим простейшую модель (toy model) латеральной структуры, состоящей из двух димеров: левого (L), составленного из атомов с номерами  $-2$  и  $-1$  с энергией

$s$ -состояния  $\varepsilon_L$ , и правого (R), образованного атомами с номерами 1 и 2 с энергией  $s$ -состояния  $\varepsilon_R$ . Для обоих димеров межатомная энергия перехода электрона равна  $t$ . Легко показать [18], что функции Грина таких димеров (в отсутствии взаимодействия между ними) равны  $G_{L(R)}^{\text{dim}} = g_{L(R)} / (1 - t^2 g_L g_R)$ , где  $g_{L(R)} = (\Omega_{L(R)} + is)^{-1}$ ,  $\Omega_{L(R)} = \omega - \varepsilon_{L(R)}$ , а соответствующие плотности состояний, нормированные на два электрона  $s$ -орбитали, есть  $\rho_{L(R)}^{\text{dim}} = \delta(\Omega_{L(R)} - t) + \delta(\Omega_{L(R)} + t)$ , где  $\delta(\dots)$  — дельта-функция Дирака. Включим теперь между атомами  $-1$  и 1 взаимодействие  $\tilde{t}$ . Воспользовавшись уравнением Дайсона, получим функции Грина четырехатомной цепочки (см. Приложение, П3).

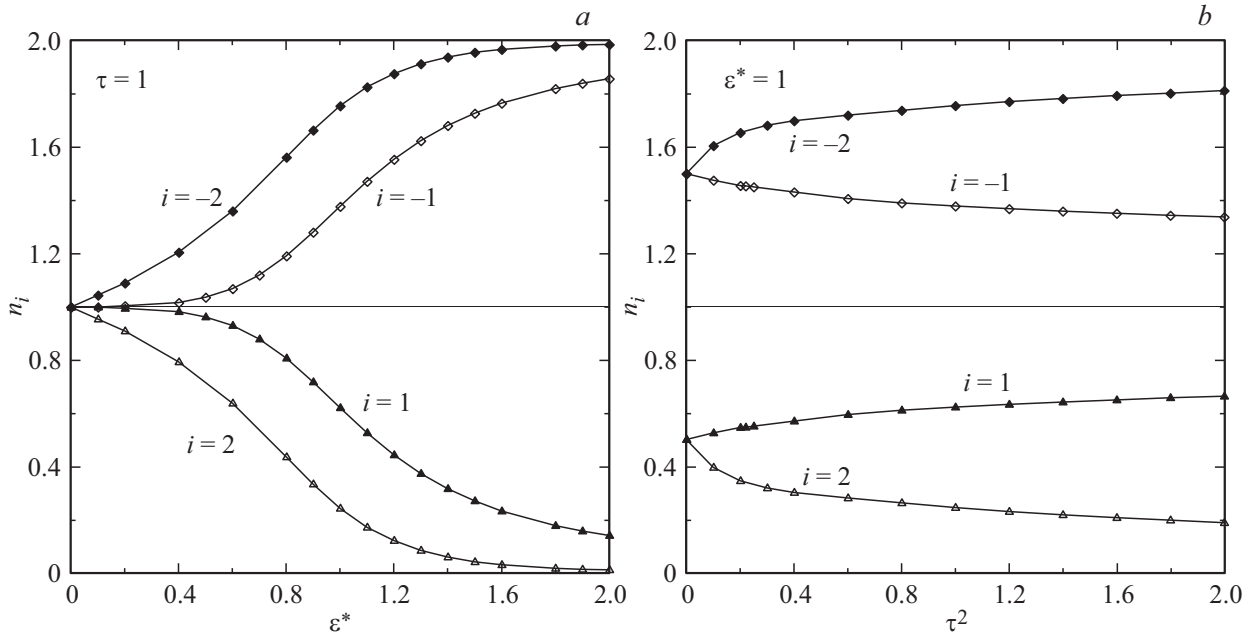
$$G_{-2,-2} = g_L \left( 1 - g_L^2 t^2 - \frac{g_L^3 g_R t^2 \tilde{t}^2}{1 - g_R^2 t^2 - g_L g_R \tilde{t}^2} \right)^{-1}, \quad (23)$$

$$G_{-1,-1} = g_L \left( 1 - g_L^2 t^2 - g_L g_R \tilde{t}^2 - \frac{g_L g_R^3 t^2 \tilde{t}^2}{1 - g_R^2 t^2} \right)^{-1}, \quad (24)$$

Функции Грина  $G_{22}$  и  $G_{11}$  получаются из выражений (23) и (24) путем замены  $g_L$  на  $g_R$  и  $g_R$  на  $g_L$ . Спектр системы определяется полюсами функций Грина, которые удовлетворяют уравнению

$$1 - (g_L^2 + g_R^2)t^2 - g_L g_R \tilde{t}^2 + g_L^2 g_R^2 t^4 = 0. \quad (25)$$

Корни этого уравнения приведены в Приложении, п. 3. На рис. 4 представлены зависимости безразмерной энергии 2-х положительных уровней системы  $\omega_{1,2}^*$  от  $\varepsilon^* = \varepsilon/t$  (a) и  $\tau^2$  (b); два отрицательных уровня имеют энергии  $\omega_3^* = -\omega_2^*$  и  $\omega_4^* = -\omega_1^*$ . Особенности функций  $\omega_{1,2}^*(\varepsilon^*, \tau^2)$  обсуждаются в п. 3 Приложения.



**Рис. 5.** Зависимости чисел заполнения  $n_i$  атомов  $i = -2, -1, 1, 2$  от приведенной энергии  $\varepsilon^*$  при  $\tau = 1$  (a) и от квадрата безразмерной константы связи  $\tau^2$  при  $\varepsilon^* = 1$  (b) при  $-\omega_2^* < \varepsilon_F^* < \omega_2^*$ .

Плотность состояний атомов четырехатомной цепочки, нормированная на два электрона, равна

$$\rho_i(\omega) = \sum_k n_{ii}^k \delta(\omega - \omega_k), \quad (26)$$

где

$$n_{ii}^k = \frac{2A_{ii}(\omega_k)}{\prod_{k' \neq k} (\omega_k - \omega_{k'})}, \quad (27)$$

$A_{-1-1} = (\omega + \varepsilon)[(\omega - \varepsilon)^2 - t^2]$ ,  $A_{-2-2} = (\omega - \varepsilon)^2(\omega + \varepsilon) - [(\omega + \varepsilon)t^2 + (\omega - \varepsilon)\tilde{t}^2]$ ,  $A_{11} = (\omega - \varepsilon)[(\omega + \varepsilon)^2 - t^2]$ ,  $A_{22} = (\omega + \varepsilon)^2(\omega - \varepsilon) - [(\omega - \varepsilon)t^2 + (\omega + \varepsilon)\tilde{t}^2]$ , индексы  $i = -1, -2, 1, 2$  нумеруют атомы, индексы  $k = 1, 2, 3, 4$  — корни уравнения (25).

На рис. 5 приведены зависимости чисел заполнения атомов  $n_i = \int_{-\infty}^{\varepsilon_F} \rho_i(\omega) d\omega$  от параметров задачи  $\varepsilon^*$  (a) и  $\tau$  (b) в предположении, что приведенный уровень Ферми системы  $\varepsilon_F^* = \varepsilon_F/t$  лежит в интервале  $(-\omega_2^*, \omega_2^*)$ , так что при нулевой температуре заполняются только уровни  $-\omega_1^*$  и  $-\omega_2^*$ . Здесь, как и в случае, изображенном на рис. 4 (см. обсуждение в Приложении, п. 3), нулевое значение  $\tau$  следует понимать как предел  $\tau \rightarrow 0^+$ . При этом число заполнения уровней атомов  $-2$  и  $-1$  равно 1.5, а число заполнения атомов  $1$  и  $2$  равно 0.5. Из рис. 5, a ясно видно, что с ростом  $\varepsilon^*$  заполнение атомов  $-2$  и  $-1$ , а  $1$  и  $2$  убывает, что вполне объясняется сдвигами уровней (рис. 4). Рис. 5, b иллюстрирует нарастание заполнения атомов  $-2$  и  $1$  и убыль заполнения атома  $-1$  и  $2$  с ростом константы связи  $\tau$ . Наибольшие изменения заряда наблюдаются для крайних атомов ( $-2$  и  $2$ ) четырехатомной цепочки, тогда

как переход заряда для внутренних атомов ( $-1$  и  $1$ ) достаточно мал.

## 6. Заключительные замечания

В настоящей статье мы рассмотрели свободные латеральные ГС. В принципе, полученные результаты нетрудно обобщить на эпитаксиальные структуры. Для этого нужно в выражениях (1), (2), (23)–(25), (П9), (П10) добавить в знаменатели одноатомных функций Грина  $g, g_{A(B)}, g_{C(D)}, g_{ii}$  сдвиги и уширения атомных уровней  $\Lambda(\omega)$  и  $\Gamma(\omega)$ , возникающие вследствие взаимодействия контактирующих решеток с подложкой [11,12,15,18,19]. Воспользовавшись приведенной здесь схемой, сравнительно просто рассмотреть также контакты графеноподобных структур (как свободных, так и эпитаксиальных). При этом следует учитывать два вида контактов: зигзагообразные и крестообразные. Отметим, что для графеноподобных ГС можно воспользоваться кластерной моделью [19] аналогично тому, как в настоящей работе использовались димеры.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

### 1. Производя стандартную замену

$$N_x^{-1} \sum_{k_x} (\dots) \rightarrow \frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk_x (\dots), \quad (П1)$$

для бесконечной одноатомной решетки из выражения (6) получим при  $\alpha^2 = 4t^2/W^2 < 1$ , где

$W = \Omega + 2t \cos(k_y \alpha)$ ,  $\Omega = \omega - \varphi$ ,  $\alpha = 2t/W$  следующее выражение [20]:

$$G_0(\omega, m, k_y) = \frac{1}{\pi W} \int_0^\pi \frac{\cos(mx) dx}{1 + \alpha \cos x} = \frac{1}{W} \frac{1}{\sqrt{1 - \alpha^2}} I_m, \quad (П2)$$

$$I_m = \left( \frac{\sqrt{1 - \alpha^2} - 1}{\alpha} \right)^{|m|}.$$

В случае, когда  $\alpha^2 > 1$  нужно заменить  $\sqrt{1 - \alpha^2}$  на  $i\sqrt{\alpha^2 - 1}$ .

Для бесконечной двухатомной решетки выражение для функции Грина (2) может быть переписано в виде

$$G_0^{AA(BB)}(\omega) = (C_{A(B)})^{-1} \frac{1}{1 - \beta \cos(2k_x \alpha)}, \quad (П3)$$

где  $C_{A(B)} = g_{B(A)} Q$ ,  $\beta = 2t^2/Q$  и  $Q = g_A^{-1} g_B^{-1} - 2t^2(2 + \cos(2k_y \alpha))$ . Тогда вместо (П2) для  $\beta < 1$  получим

$$G_0^{A(B)}(\omega, m, k_y) = \frac{1}{\pi g_{B(A)} Q} \int_0^\pi \frac{\cos(mx) dx}{1 - \beta \cos x} = \frac{1}{C_{A(B)}} \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}} \left( \frac{1 - \sqrt{1 - \beta^2}}{\beta} \right)^{|m|}.$$

При  $\beta^2 > 1$  нужно заменить  $\sqrt{1 - \beta^2}$  на  $i\sqrt{\beta^2 - 1}$ .

2. Рассмотрим некоторые частные случаи контакта одноатомных решеток, отметив, для начала, что плотность состояний полубесконечной одноатомной квадратной решетки равна

$$\rho_{L(R)} = -\pi^{-1} \text{Im } G_{L(R)} = -(\pi t)^{-1} \sin \varphi_{L(R)}. \quad (П5)$$

В случае слабой связи контактирующих решеток, т.е. при  $\tau^2 \ll 1$ , в нулевом порядке по  $\tau^2$  плотность состояний (17) переходит в (П5). В первом порядке по  $\tau^2$  имеем  $\text{Re } C \approx 1 + \tau^2 \cos 2\phi$  и  $\text{Im } C \approx \tau^2 \sin 2\phi$ , так что вместо (17) получим

$$\tilde{\rho}_{L(R)} \approx \rho_{L(R)} - (\tau^2/\pi t) \sin(\varphi_{L(R)} + 2\phi), \quad (П6)$$

или  $\tilde{\rho}_L \approx \rho_L - \tau^2/\pi t \sin(2\varphi_L + \varphi_R)$  и  $\tilde{\rho}_R \approx \rho_R - \tau^2/\pi t \sin(2\varphi_R + \varphi_L)$ . Отметим, что условие  $\tau^2 \ll 1$  отвечает ван-дер-ваальсовой связи между компонентами ГС.

Положив  $\varepsilon_L = \varepsilon_R = \varepsilon$ , получим  $\varphi_L = \varphi_R = \varphi$  и  $\rho = \rho_L = \rho_R$ , откуда найдем  $\tilde{\rho} = \tilde{\rho}_L = \tilde{\rho}_R \approx \rho[1 + \tau^2(3 - 4(\pi t)\rho^2)]$ . При  $W^2 = 4t^2$  плотность состояний  $\rho$  максимальна и равна  $\rho_{\max} = (\pi t)^{-1}$ . Отсюда следует, что при том же условии плотности состояний  $\tilde{\rho}$  имеет минимум, равный  $\tilde{\rho}_{\min} \approx \rho(1 - \tau^2)$ . Таким образом, одnogорбая плотность состояний в результате взаимодействия становится двугорбой. Это аналог возникновения связывающих и антисвязывающих состояний при взаимодействии двух урovenей.

Пусть теперь  $\delta\varepsilon = \varepsilon_R - \varepsilon_L \geq 8t$ . Это означает, что в интервале энергий, где  $\rho_L \neq 0$ , имеем  $\rho_R = 0$ , и, наоборот,  $\rho_R \neq 0$  в области, отвечающей  $\rho_L = 0$ . Тогда  $\tilde{\rho}_{L(R)} \approx \rho_{L(R)} \{1 + (\tau^2/\pi t^2)[W_{R(L)}(W_{R(L)} - \sqrt{W_{R(L)}^2 - 4t^2})]\}$ .

В пределе сильной связи при  $\tau^2 \gg 1$  имеем  $\text{Re } C \approx -\cos 2\phi/\tau^2$  и  $\text{Im } C \approx -\sin 2\phi/\tau^2$ , откуда

$$\tilde{\rho}_{L(R)} \approx \rho_{R(L)}/\tau^2. \quad (П7)$$

В этом случае следует рассматривать связанные  $\tilde{t}$ -взаимодействием  $L$ - и  $R$ -края контактирующих решеток как единую систему с плотностью состояний  $\tilde{\rho}_\Sigma = \tilde{\rho}_L + \tilde{\rho}_R \approx \rho_\Sigma/\tau^2$ , где  $\rho_\Sigma = \rho_L + \rho_R$ . Подчеркнем, что предел  $\tau^2 \gg 1$  является искусственным и приведен здесь в чисто иллюстративных целях.

При  $\tau = 1$  получаем  $\text{Re } C = 1/2$  и  $\text{Im } C = \text{ctg } \phi/2$ , так что

$$\tilde{\rho}_{L(R)} = (\rho_{R(L)} - \cos \varphi_{L(R)} \text{ctg } \phi/\pi t)/2. \quad (П8)$$

При  $\varepsilon_L = \varepsilon_R = \varepsilon$  получим  $\varphi_L = \varphi_R = \varphi$ ,  $\rho = \rho_L = \rho_R$  и  $\tilde{\rho}_L = \tilde{\rho}_R = \tilde{\rho}$ , откуда  $\tilde{\rho} = 1/2(\pi t)^2 \rho$ . Для случая  $\delta\varepsilon = \varepsilon_R - \varepsilon_L \geq 8t$  учтем, в области, где  $\rho_L \neq 0$ ,  $\rho_R = 0$  имеем  $\text{ctg } \phi = \text{ctg }(\varphi_L/2)$ ; в области, где  $\rho_L = 0$ ,  $\rho_R \neq 0$  имеем  $\text{ctg } \phi = \text{ctg }(\varphi_R/2)$ . Тогда  $\tilde{\rho}_{L(R)} = [\rho_{L(R)} - \cos \varphi_{L(R)} \text{ctg }(\varphi_{L(R)}/2)/\pi t]/2$ . Отметим, что условие  $\tau = 1$  отвечает ситуации, когда расстояние между атомами краев левой и правой подрешеток равно  $a$ .

3. Для четырехатомной цепочки, образованной двумя димерами, введем функции Грина  $G_{ij}$ , где индексы  $i$  и  $j$  пробегают значения  $-2, -1, 1$  и  $2$ . Воспользуемся уравнением Дайсона  $G = g + g\hat{T}G$ , где  $g_{ij} = g_{ii}\delta_{ij}$ ,  $g_{-2-2} = g_{-1-1} = g_L$ ,  $g_{11} = g_{22} = g_R$ ,  $\delta_{ij}$  — символ Кронекера,  $\hat{T}\hat{T}^+ = \hat{t}^2$  для взаимодействия атомов  $-1$  и  $1$  и  $\hat{T}\hat{T}^+ = \hat{t}^2$  остальных случаях. В результате получим

$$G_{-2-2} = g_{-2-2} \left( 1 - g_{-2-2} g_{-1-1} \hat{t}^2 - \frac{g_{-2-2} g_{-1-1}^2 g_{11} \hat{t}^2 \hat{t}^2}{1 - g_{11} g_{22} \hat{t}^2 - g_{11} g_{-1-1} \hat{t}^3} \right)^{-1}. \quad (П9)$$

$$G_{-1-1} = g_{-1-1} \left( 1 - g_{-2-2} g_{-1-1} \hat{t}^2 - g_{-1-1} g_{11} \hat{t}^2 - \frac{g_{-1-1} g_{11}^2 g_{22} \hat{t}^2 \hat{t}^2}{1 - g_{11} g_{22} \hat{t}^2} \right)^{-1}. \quad (П10)$$

Функции Грина  $G_{22}$  и  $G_{11}$  получаются из выражений (П9) и (П10) путем замены знаков индексов  $ij$  на противоположные. Переходя от  $g_{ij}$  к функциям Грина  $g_L$  и  $g_R$ , получим выражения (23) и (24).

Проанализируем теперь спектр системы, определяемый корнями уравнения (25), для чего положим  $-\varepsilon_L = \varepsilon_R = \varepsilon > 0$ . Тогда уравнение (П11) сводится к уравнению  $\omega^4 - 2\omega^2 b + c = 0$ , где  $b = \varepsilon^2 + t^2 + \hat{t}^2/2$ ,  $c = (\varepsilon^2 - t^2)^2 + \varepsilon^2 \hat{t}^2$ . Это уравнение имеет четыре решения:  $\omega_{1,2}^* = \sqrt{b^* \pm R^*}$  и  $\omega_{3,4}^* = -\sqrt{b^* \pm R^*}$ , где  $\omega_k^* = \omega_k/t$  ( $k = 1, 2, 3, 4$ ),  $R^* = \sqrt{4\varepsilon^{*2} + \tau^2(1 + \tau^2/4)}$ ,

$b^* = b/t^2$  и  $\varepsilon^* = \varepsilon/t$ . Легко показать, что  $(b^*)^2 - (R^*)^2 = ((\varepsilon^*)^2 - 1)^2 + \tau^2(\varepsilon^*)^2 \geq 0$ .

На рис. 3 демонстрируется зависимость приведенных энергий  $\omega_{1,2}^*$  от  $\varepsilon^* = \varepsilon/t$  (а) и  $\tau^2$  (б). Как следует из рис. 3, функции  $\omega_1^*(\varepsilon^*)$  и  $\omega_{1,2}^*(\tau^2)$  являются монотонно возрастающими, тогда как функция  $\omega_2^*(\varepsilon^*)$  имеет минимум. Такая зависимость имеет место только при значениях  $\tau^2$ , удовлетворяющих неравенству  $4 \geq \tau^2(1 + \tau^2/4)$ ; значение  $\varepsilon^*$ , отвечающее минимуму, есть  $(\varepsilon^*)_{\min} = [4 - \tau^2(1 + \tau^2/4)]^{1/2}/2$ . При  $\varepsilon^* \rightarrow \infty$  получаем  $\omega_{1,2} \rightarrow \sqrt{(\varepsilon^*)^2 \pm \varepsilon^*}$ ; при  $\tau \rightarrow \infty$  имеем  $\omega_1^* \propto \tau$ ,  $\omega_2^* \propto \varepsilon^*$ . Нулевое значение  $\tau$  (рис. 3, б) следует понимать как предел  $\tau \rightarrow 0^+$ , что отвечает взаимодействующим с бесконечно малой константой связи димерам. При этом, согласно правилам квантовой механики, состояния изолированных димеров, соответствующие приведенным энергиям  $+1$  и  $-1$ , группируются в четыре состояния с безразмерными энергиями  $+2$ ,  $-2$  и  $0$  (дважды вырожденное состояние).

## Список литературы

- [1] A.K. Geim, I.V. Grigorieva. Nature **499**, 419 (2013).
- [2] H. Wang, F. Liu, W. Fu, Z. Fang, W. Zhou, Z. Liu Nanoscale **6**, 12250 (2014).
- [3] И.В. Антонова. ФТП **50**, 67 (2016).
- [4] J. Wang, F. Ma, M. Sun. RSC Adv. **7**, 16801 (2017).
- [5] Q. Sun, Y. Dai, Y. Ma, N. Yin, W. Wei, L. Yu, B. Huang. 2D Materials **3**, 035017 (2016).
- [6] J. Zhang, W. Xie, X. Xu, S. Zhang, J. Zhao. Chem. Mater **28**, 5022 (2016).
- [7] Y. Zhao, Z. Wan, X. Xu, S.R. Patil, U. Hetmaniuk, M.P. Anantram. Sci. Rep. **5**, 10712 (2015).
- [8] S. Bruzzone, D. Logoteta, G. Fiori, G. Iannaccone. Sci. Rep. **5**, 14519 (2015).
- [9] G.C. Loh, R. Pandey. J. Mater. Chem. C **3**, 5918 (2015).
- [10] Z.-Y. Ong, G. Zhang, Y.-W. Zhang. Phys. Rev. B **93**, 075406 (2016).
- [11] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, О.В. Посредник. Элементарное введение в теорию наносистем. Лань, СПб (2014). 192 с.
- [12] С.Ю. Давыдов. Теория адсорбции: метод модельных гамма-функций. Изд-во СПбГЭТУ ЛЭТИ, СПб (2013). 235 с.; twirpx.com/file/1596114/
- [13] D. Kalkstein, P. Soven. Surf. Sci. **26**, 85 (1971).
- [14] Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн. Поверхности и границы раздела полупроводников. Мир, М. (1990). 488 с.
- [15] С.Ю. Давыдов. ФТТ **58**, 1182 (2016).
- [16] D.M. Newns. Phys. Rev. **178**, 1123 (1969).
- [17] T.L. Einstein, J.R. Schrieffer. Phys. Rev. B **7**, 8, 3629 (1973).
- [18] С.Ю. Давыдов. ФТТ **54**, 2193 (2012).
- [19] С.Ю. Давыдов. ФТТ **59**, 1650 (2017).
- [20] И.С. Градштейн, И.М. Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. Наука, М. (1971). 1108 с.

Редактор Т.Н. Василевская