Выражения для α и β могут быть найдены из (ч. I.19.6):

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - E(k)\right]\alpha + V\left(\frac{\pi}{a}\right)\beta = 0,$$
$$V^*\left(\frac{\pi}{a}\right)\alpha + \left[\frac{\hbar^2}{2m}\left(k - \frac{2\pi}{a}\right)^2 - E(k)\right]\beta = 0. \tag{2.122}$$

При $k = \pi/a + \varepsilon$ и $\gamma = (\hbar^2\pi/ma|V|)\varepsilon$ получаем

$$\psi = b\left[\exp\left(i\frac{\pi}{a}z\right) + \frac{|V|}{V}\left(-\gamma \pm \sqrt{\gamma^2+1}\right)\exp\left(-i\frac{\pi}{a}z\right)\right]\exp(i\varepsilon z) \tag{2.123}$$

и

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi}{a} + \varepsilon\right)^2 \pm |V|\left(-\gamma \pm \sqrt{\gamma^2+1}\right). \tag{2.124}$$

Для действительного ε выражение (2.124) дает зоны, представленные на рис. 34, *а*. Волновые функции (2.120) и (2.123) могут быть «сшиты» друг с другом для произвольного значения E. В полупространстве $z < 0$ для этого необходимы два решения: $\psi(k, z)$ и $\psi(-k, z)$, линейная комбинация которых «сшивается», с вакуумными решениями. Энергетические зоны бесконечной решетки в таком случае, исключая малые поправки, остаются неизменными.

Наряду с зонами мы теперь находим *решения, локализованные на поверхности*. Так как (2.123) является решением только в полупространстве $z < 0$, параметр ε может быть также и мнимым. Для $\varepsilon = -iq$ с действительным положительным q появляются решения, которые экспоненциально убывают в кристалле. При $\gamma = i\sin(2\delta) = -i(\hbar^2\pi/ma|V|)q$ находим из выражения (2.123)

$$\psi = c\left\{\exp\left[i\left(\frac{\pi}{a}z \pm \delta\right)\right] \pm \frac{|V|}{V}\exp\left[-i\left(\frac{\pi}{a}z \pm \delta\right)\right]\right\}\exp(qz). \tag{2.125}$$

Энергия, соответствующая этому решению, имеет вид

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\left(\frac{\pi}{a}\right)^2 - q^2\right] \pm |V|\left[1 - \left(\frac{\hbar^2\pi q}{ma|V|}\right)^2\right]^{1/2} \tag{2.126}$$

Она является действительной для $0 \leqslant q \leqslant q_{max} = ma|V|/\hbar^2\pi$.

Для $q = 0$ получаются решения

$$\psi = c\left[\exp\left(i\frac{\pi}{a}z\right) \pm \frac{|V|}{V}\exp\left(-i\frac{\pi}{a}z\right)\right] \sim \begin{cases} \cos\frac{\pi}{a}z & \text{для} \quad V > 0, \\ \sin\frac{\pi}{a}z & \text{для} \quad V < 0, \end{cases} \tag{2.127}$$

которые соответствуют энергиям двух краев зоны. В зависимости от знака фурье-компонента V потенциала нижнее собственное значение связывают с синусоидальной функцией и верхнее — с косинусоидальной функцией, или наоборот.