

Из-за неизвестного вида функции $U(r)$ трудно обсуждать (2.2) в общем виде. Простейший вид этой функции получаем, если в качестве дефекта рассматриваем атом — донор в простом полупроводнике, т. е. $(n+1)$ -валентный атом в ковалентно связанной решетке n -валентных атомов. Атом — донор вносит тогда один электрон и один дополнительный положительный заряд атомного ядра. Этот электрон не нужен для ковалентных связей с ближайшими соседями. В этом случае $U(r)$ есть потенциал дополнительного положительного заряда, в поле которого движется добавочный электрон.

При больших расстояниях электрона от положительного заряда кристаллическая решетка экранирует кулоновский потенциал подобно однородной среде с диэлектрической проницаемостью ϵ в соответствии с соотношениями (1.36). Используя это континуальное приближение и подставляя, таким образом, в (2.2) потенциал

$$U(r) = -\frac{e^2}{\epsilon r}, \quad (2.3)$$

мы сводим возмущающий потенциал к потенциалу атома водорода в среде с диэлектрической проницаемостью ϵ .

Продолжаем решать (2.2) способом, подобным намеченному в общих чертах в ч. I, § 21 для движения волнового пакета в электрическом поле. Для движения электрона в поле $U(r)$ дефекта строим волновой пакет из блоховских функций:

$$\psi = \sum_{n,k} c_n(k) \psi_n(k, r). \quad (2.4)$$

Подставляем эту функцию в (2.2) и получаем, в соответствии с (ч. I.21.12),

$$\begin{aligned} \sum_{n,k} c_n(k) (H_0 + U) \psi_n(k, r) &= \sum_{n,k} c_n(k) [E_n(k) + U] \psi_n(k, r) = \\ &= \sum_{n,k} c_n(k) [E_n(-i\nabla) + U] \psi_n(k, r) = E\psi. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Дальнейшее преобразование становится возможным, только если ограничить число блоховских функций, использованных для построения волнового пакета.

В качестве первого ограничения воспользуемся только функциями зоны проводимости. Это можно сделать, если энергия, с которой электрон связан в дефекте, мала по сравнению с энергией, с которой валентный электрон связан в решетке (ширина энергетической щели E_g). В противном случае следует учитывать также блоховские функции валентной зоны. Дефекты, к которым эти ограничения могут быть применимы, называются *мелкими примесями*. Данное условие выполняется для большинства доноров. Дефекты, энергия связи которых сравнима с E_g , действуют как ловушки и центры рекомбинации (§ 20). Энергии связи важнейших доноров в Ge и Si составляют менее 1% от ширины запрещенной зоны.