Таким образом, в (2.5) можно опустить суммирование по n и, следовательно, сам индекс. Находим

$$[E(-i\nabla)+U]\psi = E\psi, \quad \text{где} \quad \psi = \sum_{\mathbf{k}} c(\mathbf{k})\,\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}). \tag{2.6}$$

Второе ограничение следует из (2.3). Замена решетки однородной средой с заданной диэлектрической проницаемостью содержит предположение, что орбита связанного в дефекте электрона пересекает много элементарных ячеек кристаллической решетки. Пространственная протяженность волнового пакета, таким образом, велика по сравнению с постоянной решетки. Следовательно, его протяженность в $\mathbf{k}$-пространстве мала по сравнению с размерами зоны Бриллюэна. Таким образом, в (2.4) дают вклад лишь векторы $\mathbf{k}$ из узкой области вокруг минимума зоны. Если рассматривать сначала случай простого, изотропного параболического минимума при $\mathbf{k}=0$, то суммирование в (2.4) идет только по малым значениям $\mathbf{k}$. Поскольку периодичная с периодом решетки часть u в блоховской функции $\psi(\mathbf{k}, \mathbf{r}) = u(\mathbf{k}, \mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ лишь медленно меняется с $\mathbf{k}$, можно заменить $u(\mathbf{k}, \mathbf{r})$ через $u(0, \mathbf{r})$. Получаем, таким образом, волновой пакет

$$\psi = \sum_{\mathbf{k}} c(\mathbf{k})\,u(0, \mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) = \\ = \left[\sum_{\mathbf{k}} c(\mathbf{k})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\right]\psi(0, \mathbf{r}) \equiv F(\mathbf{r})\,\psi(0, \mathbf{r}). \tag{2.7}$$

Если подставить это в (2.6), то оттуда с учетом (ч. I.21.9) и

$$E(-i\nabla)F(\mathbf{r})\,\psi(0, \mathbf{r}) = \sum_m E_m F(\mathbf{r}+\mathbf{R}_m)\,\psi(0, \mathbf{r}+\mathbf{R}_m) = \\ = \psi(0, \mathbf{r})\sum_m E_m \exp(R_m\cdot\nabla)F(\mathbf{r}) = \psi(0, \mathbf{r})\,E_n(-i\nabla)F(\mathbf{r}) \tag{2.8}$$

следует, что

$$[E(-i\nabla)+U]F(\mathbf{r}) = EF(\mathbf{r}). \tag{2.9}$$

Уравнение (2.9) отличается от (2.6) тем, что быстро меняющаяся функция ψ заменена на медленно меняющуюся «огибающую функцию» $F(\mathbf{r})$. Тогда можно разложить оператор $E(-i\nabla)$ в ряд и оборвать разложение после квадратичного члена

$$E(-i\nabla) = E_C - \frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 \tag{2.10}$$

(где E_C — нижний край зоны проводимости). Это приводит к уравнению

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\nabla^2 - \frac{e^2}{\varepsilon r}\right)F(\mathbf{r}) = (E - E_C)\,F(\mathbf{r}), \tag{2.11}$$

где явный вид для $U(\mathbf{r})$ подставлен из (2.3).