

Уравнение (2.11) есть уравнение Шредингера для электрона с эффективной массой m^* в поле положительного заряда в среде с диэлектрической проницаемостью ϵ . Решение этого уравнения известно из задачи об атоме водорода. Собственные значения таковы:

$$E_l = E_c - \frac{1}{n^2} \frac{e^4 m^*}{2\epsilon^2 \hbar^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.12)$$

Огибающая функция для основного состояния имеет вид

$$F(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^{*3}}} \exp\left(-\frac{r}{a_0^*}\right), \quad a_0^* = \frac{\hbar^2}{m\epsilon^2} \frac{m}{m^*} e. \quad (2.13)$$

Собственные функции для возбужденных состояний легко можно получить подобным образом.

Прежде всего видим, что связанные состояния электрона образуют водородоподобный спектр, который лежит под нижним краем зоны проводимости. Боровский радиус орбиты основного состояния увеличен по отношению к своему значению для свободного атома водорода ($0,53 \text{ \AA}$) фактором $\epsilon(m/m^*)$. Для Si и Ge это приводит к значениям, заключенным между 20 и $50 \text{ \AA}$. Ниже мы увидим, что энергия связи для таких орбит воспроизводится этим приближением достаточно хорошо, а для еще больших орбит возбужденных состояний согласие почти точное.

Протяженность волнового пакета в k -пространстве можно получить, вычислив коэффициенты $c(k)$ разложения в (2.7) для известной функции $F(r)$. Для коэффициентов находим:

$$c(k) = \frac{8\pi^{1/2}}{V_g^{1/2} a_0^{*5/2}} (k^2 + a_0^{*-2})^{-2}. \quad (2.14)$$

Волновой пакет ограничен в k -пространстве областью с радиусом порядка $1/a_0^*$. В Si и Ge это составляет лишь несколько процентов среднего радиуса зоны Бриллюэна.

Результаты (2.12) и (2.14) наводят на мысль, что на $E(k)$ -диаграмме зонной модели следовало бы представить *донорные уровни* как дискретные состояния под минимумом зоны проводимости. Ширина уровня [определяемая на основании (2.14)] также может быть показана на диаграмме, как мера концентрированности волнового пакета (2.7) в k -пространстве. Это показано на рис. 18 для рассматривавшегося до сих пор случая атома — донора в полупроводнике с изотропным параболическим минимумом зоны проводимости.

Мы использовали Si и Ge в качестве примеров определения порядка величины, которого следует ожидать для энергий связи и боровских радиусов, хотя эти полупроводники и демонстрируют заметные отклонения от изотропной модели. Необходимые поправки можно легко найти, если заметить, что эти поправки касаются пред-