

硅中磷塞曼杂化态的波函数混和与组成

沈学础 朱景兵 穆耀明 刘普林

(中国科学院上海技术物理研究所红外物理国家重点实验室 上海, 200083)

(1993年8月17日收到)

报道了硅中磷塞曼(Zeeman)杂化态的波函数混和与组成的直接实验观测结果和理论讨论. 用高灵敏度、高分辨率光热电离谱方法定量测量了高纯硅中孤立磷杂质“反相交”(anti-crossing)塞曼跃迁附近跃迁强度的系统演变,由此导出杂化的束缚杂质电子塞曼能态的波函数组成. 用有效质量模型框架下的变分方法计算和讨论了杂化态的波函数组成及相应的跃迁强度,并与实验结果相比较.

PACC: 7850; 7155; 7170

1 引言

凝聚态固体中强相互作用的微观状态间的杂化混和是一个普遍和有趣的现象,历来引起人们的注意^[1-3]. 以半导体中的电子态为例,有半磁半导体中磁性原子的d电子态与阴离子的p电子态间的杂化混和^[3-5]; 半导体量子阱中重空穴态与轻空穴态间的杂化混和、 Γ 导带态与X导带态的杂化混和^[6-8]; 施主杂质的相同宇称、不同主量子数塞曼能级间的杂化混和^[9-12]; 以及电子态与声子等其他类型微观状态间的杂化混和^[3,13]等. 两电子态发生杂化混和时,两态间互相排斥,使原本能量简并的两个状态在能量上分开. 如果这两个相互作用的电子态的能量随某些参数(如波矢、量子阱层厚度、磁场强度以至实验位形结构等)系统变化,那么调节这些参数可以改变两态间的能量关系,从而研究它们间杂化耦合的演变和过程. 以半导体硅中施主杂质塞曼能级间的杂化混和为例,由于不同量子数的塞曼能级随磁场漂移的速度很不一样,如果实验位形的选择使得导致杂化混和的微扰哈密顿量不为零,那么因随磁场漂移速率不同而原本相交的塞曼能级将不再相交而互相排斥开来,并称之为“不相交”或“反相交”. 互相排斥引起的或附加的两态间的能量距离决定于相互作用的强弱,而相互作用的强弱又与两态间原来的能量差有关. 因此这种塞曼能级不相交现象仅发生在一定的能量范围内,也即一定的磁场范围内.

迄今为止,人们已经发展了不少理论方法和模型^[4,6,9-12],研究和计算各种不同杂化能态的色散关系或能量随外扰(磁场、量子阱阱宽等)变化的关系. 与此同时,人们也进行了大量的实验研究^[3,4,9,13-17],证实了理论给出的能量图象和色散关系. 然而对杂化态的波函数组成情况及其随波矢或外扰的演变迄今未见任何实验研究报道. 尽管理论上如描述体块材料或超晶格能带态时采用的原子轨道线性组合(LCAO)那样(或者基于微扰理论),人们常常可以从参于杂化的初态的波函数 ψ_i 的线性组合构成杂化态的波函数,即

$$\psi = \sum_i C_i \phi_i, \quad (1)$$

式中 C_i 是展开系数, 与 ϕ_i 相比是一个随晶格周期缓变的包络调制函数。然而迄今并未见到任何实验结果直接证实(1)式给出的杂化态波函数组成。统观有关杂化能态的实验研究, 考虑到其波函数组成的实验研究的难度, 这一状况并不令人意外。

本文报道硅中磷施主塞曼杂化态的波函数混和与组成的直接实验观测结果和理论讨论。磷施主塞曼能级相互耦合杂化和发生“反相交”现象时, 少许情况下参于杂化的主要仅有两个能级, 并且它们的光跃迁强度, 即其偶极跃迁振子强度有较大差异, 加之前几年发展了高灵敏度、高分辨率光热电离谱方法^[19-20], 使得作者能够通过“反相交”区域及其前后光跃迁强度的系统变化规律的实验结果直接导出(1)式的展开系数 C_i , 即直接测量塞曼杂化态的波函数组成及其随耦合作用强弱或外扰参数(磁场)的改变。此外, 本文还用有效质量模型框架下的变分方法计算和讨论了这种杂化态的波函数组成, 并与实验结果相比较。

2 实 验

实验样品为沿 $\langle 111 \rangle$ 方向切割的高纯区熔硅单晶, 残余浅杂质主要是磷施主, 浓度为 10^{12}cm^{-3} 。采用如此高纯样品的原因在于确保样品中施主中心都可以被看作是孤立的, 并且即使被激发到不很高的量子数的激发态时, 它们的波函数间的相互交叠也可以忽略不计, 同时避免跃迁谱线非本征增宽和利于不含糊地观测各谱线强度演变。样品沿 $\langle 111 \rangle$ 方向切割是因为磁场沿这一方向时最容易观察到塞曼能级的“反相交”现象, 同时这种位形下硅的所有导带椭球能谷相对于磁场的取向等价, 有助于简化理论讨论以及理论与实验结果之间的比较。

鉴于通常远红外光谱方法不可能观察到本文选择的高纯样品中的杂质光跃迁现象, 采用磁场下的光热电离谱方法测量高纯硅中磷施主的光跃迁谱线、塞曼分裂和漂移, 以及与塞曼能级间杂化耦合和“反相交”有关的跃迁谱线能量与强度变化的规律。实验采用的磁体为 Oxford-S11/12L 型超导磁体, 最高场强为 11T。样品置于超导磁体内杜瓦中, 来自傅里叶变换光谱仪的远红外光经光波导传输入磁体并投射到样品上。实验位形为 $B \parallel k \parallel \langle 111 \rangle$ 晶轴, 这里 k 为入射远红外光波矢, 因而入射光电矢量与磁场垂直。样品温度为 15K。

3 实验结果

图 1 给出 $300-350 \text{cm}^{-1}$ 范围内 $B \parallel k \parallel \langle 111 \rangle$ 情况下高纯硅中磷施主的光热电离谱及其塞曼分裂和漂移。图 1 中横坐标为波数, 纵坐标为光热电离谱响应, $2P_{\pm}, 3P_0, 4P_0, 3P_{\pm}$ 等为从 $1S(A_1)$ 基态出发的磷施主的跃迁谱线。图 1 中给出的 21 个光谱是不同磁场强度下的结果, 从下到上磁场强度渐增, 从 $B = 0$ 到 10 T, 每隔 0.5 T 记录一个光谱。在 350cm^{-1} 以上还有许多谱线和它们的塞曼分裂及漂移, 但十分复杂, 需要进一步指认和论

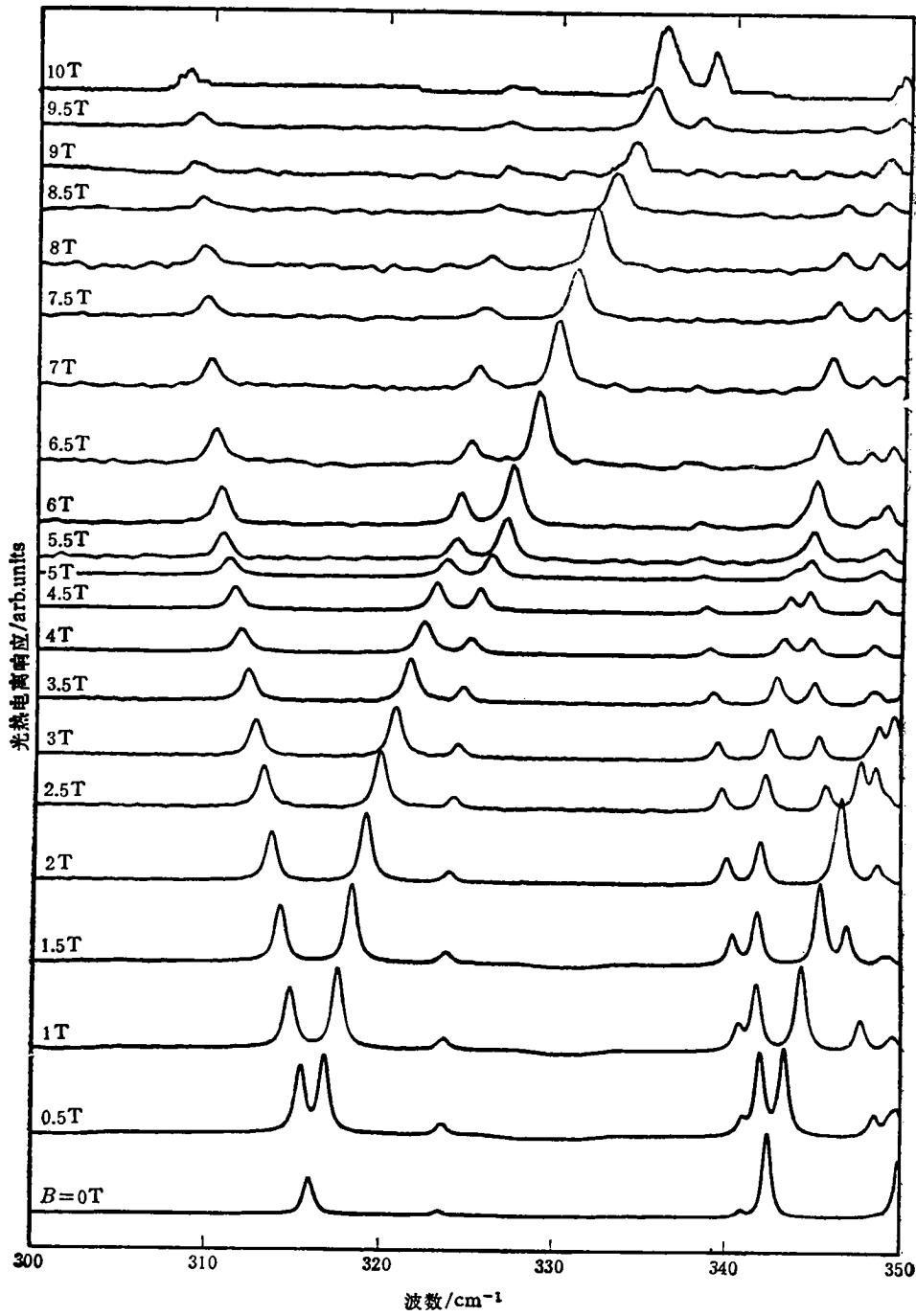


图1 在 $300-350\text{cm}^{-1}$ 范围内和 $B//k//\langle 111 \rangle$ 情况下, 高纯硅中磷施主的光热电离谱及其随磁场的变化 从下到上磁场从 $B=0$ 到 10T 渐增, 间隔为 0.5T

证, 我们将另文讨论. 由图1首先可见, 塞曼分裂的跃迁谱线 $2P_-$ 与 $2P_+$ 之间没有其他弱谱线存在的迹象, 这表明切割样品时的定向有很高的精度 ($<0.5^\circ$), 因而随后讨论数据

时,不必考虑与此相关的误差。图 1 给出的最重要的结果为 $B \approx 5\text{T}$ 时, $1\text{S} \rightarrow 2\text{P}_+$ 与 $1\text{S} \rightarrow 3\text{P}_0$ 跃迁谱线互相排斥及其跃迁强度的规律性变化。此外,在 $B = 10\text{T}$ 附近,可以观察到表观的 $1\text{S} \rightarrow 3\text{P}_0$ 与 $1\text{S} \rightarrow 4\text{P}_0$ 跃迁谱线互相排斥及其强度的有趣变化。不难预期,如果实验磁场强度能更高一些,人们还可以观察到与 $\langle 1\text{S} \rightarrow 2\text{P}_+ \rangle - \langle 1\text{S} \rightarrow 3\text{P}_0 \rangle$ 跃迁互相排斥相似的相互作用过程的全貌。

图 2 综合给出实验观察到的 $300-350\text{cm}^{-1}$ 范围内 $B//k//\langle 111 \rangle$ 情况下,高纯硅中磷施主的量子数较低的几条塞曼谱线跃迁能量随磁场变化的结果。弱磁场下(如 $B < 1\text{T}$) 这些谱线从下到上可以分别指认为 $1\text{S}(A_1)$ 到 $2\text{P}_-, 2\text{P}_+, 3\text{P}_0, 4\text{P}_0, 3\text{P}_-$ 和 3P_+ 的跃迁。下面将会看到,强磁场下它们的物理属性未必是符合这一指认序列的跃迁过程,尽管文献中迄今在判定这些谱线对应的跃迁过程时常常混同弱磁场下和强磁场下的指认。图 2 更清楚地说明了图 1 的结果,在 $B \approx 5\text{T}$ 时,本应相交的 2P_+ 跃迁与 3P_0 跃迁相互杂化耦合而排斥,这一磁场下它们间的能量差 $\Delta E \approx 4.1\text{cm}^{-1} \approx 0.5\text{meV}$ 。在 $B = 10\text{T}$ 附近,弱磁场下指认为 3P_0 与 4P_0 的本应相交的两跃迁过程也因杂化耦合而排斥开来,并且 ΔE 也约为 0.5meV 。图 2 还表明,在 $B \approx 0.8\text{T}$ 时,弱磁场下指认为 4P_0 与 3P_- 的两个跃迁过程间也发生杂化耦合而排斥开来的过程,并且它们间的最小能量差为 $\Delta E \approx 1.5\text{cm}^{-1}$ 。

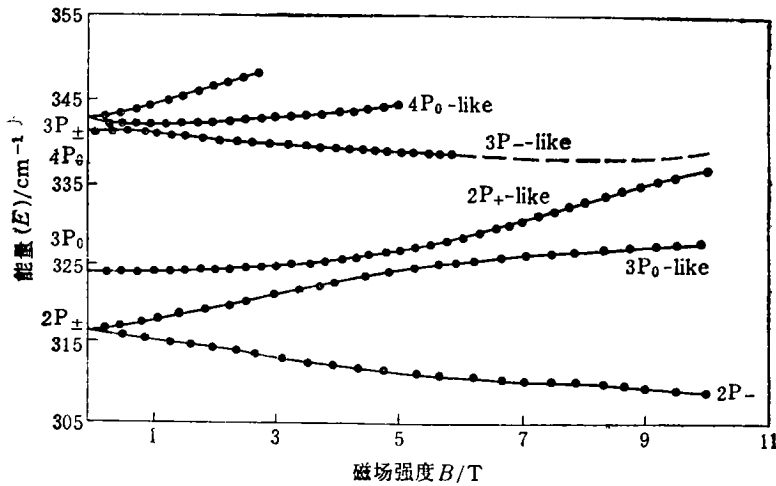


图 2 实验观测到 $300-350\text{cm}^{-1}$ 范围内和 $B//k//\langle 111 \rangle$ 情况下,高纯硅中磷施主的量子数较低的几条塞曼谱线跃迁能量 E 随磁场 B 的变化

4 塞曼杂化态的波函数混和与组成

图 3 综合给出实验观察到的 $B//k//\langle 111 \rangle$ 情况下同一样品的弱磁场下指认为 2P_+ , 3P_0 和 4P_0 的三条塞曼跃迁谱线积分强度随磁场变化的结果。与图 2 比较可见,在 2P_+ 与 3P_0 能级发生杂化耦合的磁场范围内,弱磁场下指认为 $1\text{S} \rightarrow 2\text{P}_+$ 和 $1\text{S} \rightarrow 3\text{P}_0$ 的两个跃迁过程的光跃迁强度向相反方向演变,以至在较强磁场强度情况下,如 $B \approx 8\text{T}$ 时,其强度对比正好与弱磁场情况相反。类似的情况发生在弱磁场下指认为 $1\text{S} \rightarrow 3\text{P}_0$ 与 $1\text{S} \rightarrow$

$4P_0$ 的两个跃迁之间,在 B 为 6—9T 范围内, $1S \rightarrow 4P_0$ 跃迁由于跃迁振子强度较弱,完全淹没在噪声背景中而观察不到。但在磁场强度为 9T 以上,该跃迁强度急剧增强,并伴随着与之杂化的弱磁场下指认为 $1S \rightarrow 3P_0$ 跃迁的谱线强度随磁场增大,而明显下降。从图 3 人们不难预见,在稍高于 10T 的磁场强度下这两个跃迁的强度将相等,然后向相反方向演化。令人遗憾的是,由于实验条件限制,本文实验未能扩展到更高一些的磁场,因而不能给出这一“反相交”点附近相关谱线跃迁强度演变的全貌。 $1S \rightarrow 4P_0$ 跃迁在 0—4T 磁场强度范围内跃迁强度的变化比较复杂,仔细研究图 1—3 表明,它涉及 $4P_0$ 与 $3P_-$; $3P_+$ 甚至 $4P_-$ 之间可能的杂化耦合相互作用。

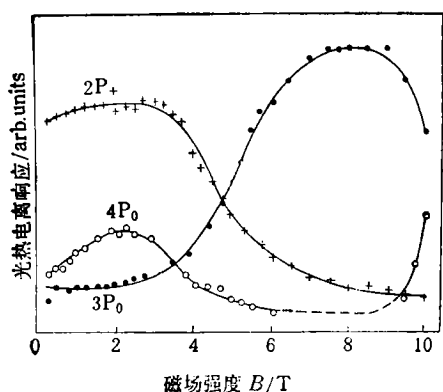


图 3 实验观察到的 $B \parallel k \parallel \langle 111 \rangle$ 情况下,同一样品的弱磁场下指认为 $2P_+$, $3P_0$ 和 $4P_0$ 的三条塞曼跃迁谱线积分强度随磁场 B 的变化

出的谱线跃迁强度演变规律,以塞曼跃迁为例,提供了凝聚态固体中一定条件下发生的电子态之间杂化和波函数混和的直接证据。以 $2P_+$ 与 $3P_0$ 态间的杂化耦合为例,如上指出,我们的实验位形严格遵从 $B \parallel k \parallel \langle 111 \rangle$ 位形,与硅的 6 个椭圆导带谷相联系的杂质态相对于磁场是等价的,同时图 2 表明,在杂化耦合区域,其他跃迁过程与它们间的能量距离也足够远,因而可以用最简单的两能级相互作用模型来描述它们间的杂化耦合,并如 (1) 式那样将相互作用的上下两态的波函数写为

$$\begin{aligned} \psi_u &= A_u \psi_{3P_0} + B_u \psi_{2P_+}, \\ \psi_l &= A_l \psi_{2P_+} + B_l \psi_{3P_0}, \end{aligned} \quad (2)$$

式中脚标 u 代表与上能级有关的波函数和展开系数, l 代表与下能级有关的波函数和展开系数。在本文所研究的狭窄能量范围内,可以忽略杂质激发态电子的热电离概率的变化,于是光热电离谱线强度主要决定于偶极吸收跃迁强度,并且可以认为光跃迁矩阵元 $\langle 1S | H_{eR} | 2P_+ \rangle$ 和 $\langle 1S | H_{eR} | 3P_0 \rangle$ 随磁场是缓变的,这意味着我们忽略由此引起的跃迁强度随磁场的缓慢变化。那么可以从图 3 实验结果求得 (2) 式的展开系数 A_u , B_u , A_l 和 B_l 及其随磁场变化的规律。图 3 也给出这种波函数混和发生的磁场范围和能量范围,对 $2P_+$ 和 $3P_0$ 态而言,这一磁场范围为 $\Delta B = 7T - 3T = 4T$; 能量范围为 $\Delta E \approx 7.2 \text{ cm}^{-1} = 0.9 \text{ meV}$ 。这样图 3 清楚地表明,尽管耦合杂化发生时参于互作用的两个态在能量上互相排斥,但它们的波函数恰充分地混和,并且表征波函数组成的展开系数 $A_{u,l}^2$ 和 $B_{u,l}^2$ 在 $B \approx 4.75T$ 时发生交叉,以至光跃迁涉及的物理特征和物理实质发生交叉和转变。于弱磁场下指认为 $1S \rightarrow 2P_+$ 的塞曼跃迁,在 $B = 4.75T$ 以上演变成 $3P_0$ 波函数起主导作用的跃迁,并且在 7—8T 以上变成纯粹的 $1S \rightarrow 3P_0$ 跃迁;弱磁场下指认为 $1S \rightarrow 3P_0$ 的谱线演变过程与此正好相反,在 4.75T 以上,它是 $1S \rightarrow 2P_+$ 起主导作用的跃迁;并且在略高于 10T 磁场下,将因与更高能量的态的杂化混和而再次改变光跃迁过程的物理特征。这样在 $B = 5T$ 以上和 10T 以下,图 2 中从低能到高能,诸跃迁谱线应

分别指认为 $1S(A_1)$ 到 $2P_-, 3P_0, 2P_+, 3P_-$ 和 $4P_0$ 的跃迁。

顺便指出,图 2 和 3 表明,硅中磷塞曼能态间的杂化混和发生在相同宇称(在此都为 P 态)、不同主量子数的能级之间。

5 理论讨论

为从理论上解释上两节描述的实验结果,并估计与杂化态有关的光跃迁能量色散和强度演变,我们发展和推广了 Faulkner 形式的有效质量理论^[12,21],使之包括磁场对杂质电子态的效应,并采用变分法从包括全部磁场效应的哈密顿量计算塞曼能级和它们间杂化耦合随磁场的变化。

计及磁场效应的杂质态波函数由归一化的类氢波函数 $\phi_{nlm}(x, y, z) = R_{nl}(\alpha_{lm}, r) \times Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 构成,可写为

$$\phi_{nlm} = \left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^{l/4} \phi_{nlm} \left[x, y, \left(\frac{\beta}{\gamma}\right)^{1/2} z \right], \quad (3)$$

式中

$$R_{nl}(\alpha_{lm}, r) = \frac{2\alpha_{lm}^{3/2}}{n^2} \left[\frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3} \right]^{1/2} \left(\frac{2\alpha_{lm}r}{n}\right)^l \times \exp\left(-\frac{\alpha_{lm}r}{n}\right) L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2\alpha_{lm}r}{n}\right), \quad (4)$$

$\gamma = m_{\perp}/m_{\parallel}$, α_{lm} 和 β 为变分参数。互相正交的函数 ϕ_{nlm} 的数目 N 决定于计算时拟用的最大主量子数 n , 例如对偶宇称态,若最大主量子数 n 为 5, 则 $N = 29$ 。由这 N 个互相正交的波函数可以解析地表达杂质电子态的哈密顿矩阵。

哈密顿矩阵中与磁场有关的线性项 H_1 和二次项 H_2 可写为^[12]

$$H_1 = \gamma^* \left\{ \eta_{pm}(L_x B_x + L_y B_y) + L_z B_z + i\eta_{pm}(1-\beta)(yB_x - xB_y) \frac{\partial}{\partial z} \right\}, \quad (5)$$

$$H_2 = \left(\frac{\gamma^*}{2}\right)^2 \{ \eta_{pm}^2 z^2 (B_x^2 + B_y^2) - 2\eta_{pm} B_z (xB_x + yB_y) + (x^2 + y^2) B_z^2 + \gamma(yB_x - xB_y)^2 \}, \quad (6)$$

式中 $\gamma^* = \hbar e B / 2Rm_{\perp}c$, R 为等效里德堡能量, $\eta_{pm} = (\gamma/\beta)^{1/2}$ 。对 $\mathbf{B} \parallel \mathbf{k} \parallel \langle 111 \rangle$ 的实验位形, H_1 和 H_2 可分项写为

$$H_{1a} = \frac{1}{\sqrt{3}} \gamma^* B [\eta_{pm}(L_x + L_y) + L_z], \quad (7)$$

$$H_{1b} = -\frac{i}{\sqrt{3}} \gamma^* B \eta_{pm} (\beta - 1) \sin \theta (\cos \varphi - \sin \varphi) \left(r \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right), \quad (8)$$

$$H_{2a} = \frac{1}{3} \left(\frac{\gamma^* B r}{2} \right)^2 [(1 + \gamma) \sin^2 \theta + \eta_{pm}^2 \cos^2 \theta], \quad (9)$$

$$H_{2b} = -\frac{1}{3} \eta_{pm} \left(\frac{\gamma^* B r}{2} \right)^2 \sin 2\theta (\sin \varphi + \cos \varphi), \quad (10)$$

$$H_{2c} = -\frac{1}{3} \gamma \left(\frac{\gamma^* B r}{2} \right)^2 \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi. \quad (11)$$

在本文实验位形下, H_{2a} 为导致同宇称不同主量子数和磁量子数的塞曼能态杂化混和的主要哈密顿项, 但 H_{1b} , H_{2b} 和 H_{2c} 也对这些态的杂化混和有贡献, 其中 H_{1b} 在弱磁场时贡献大。

浅施主从基态 $1S(A_1)$ 到不同激发态光跃迁的吸收系数可写为

$$\sigma = \frac{4\pi^2 e^2 \omega}{nc} |\langle \varphi_{ex} | \mathbf{R} \cdot \mathbf{e} | \varphi_g \rangle|^2 \delta(E_{ex} - E_g - \hbar\omega), \quad (12)$$

式中 n 为折射率, \mathbf{e} 为入射光偏振方向的单位矢量, $E_{ex} - E_g$ 为激发态与基态能量差。对非偏振光, 上式中的偶极跃迁矩阵元大小决定于

$$\{|\langle \varphi_{ex} | x | \varphi_g \rangle|^2 + |\langle \varphi_{ex} | y | \varphi_g \rangle|^2 + |\langle \varphi_{ex} | z | \varphi_g \rangle|^2\}.$$

利用上面给出的波函数和矩阵元表达式, 我们已经数值计算了塞曼跃迁和与杂化能级有

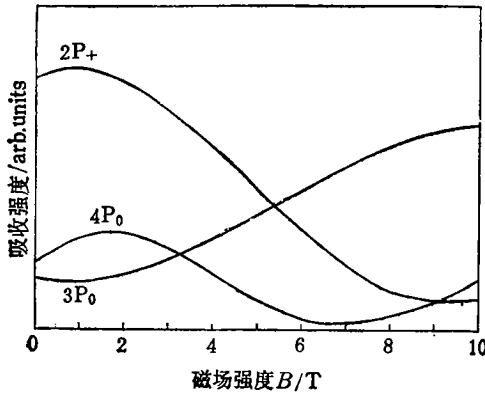


图4 在 $B//k//\langle 111 \rangle$ 情况下, 从 $1S$ 基态到 $2P_+$, $3P_0$ 和 $4P_0$ 激发态跃迁的吸收系数随磁场 B 变化的理论计算结果

有关的跃迁能量随磁场的变化关系, 计算结果与实验符合良好^[12]。这样计算获得的不同磁场下从 $1S(A_1)$ 态到弱磁场下指认为 $2P_+$, $3P_0$ 和 $4P_0$ 的吸收跃迁强度如图4所示。图4表明, 这样的计算合理地解释了 $B \approx 5T$ 弱磁场下指认为 $1S \rightarrow 2P_+$ 和 $1S \rightarrow 3P_0$ 的跃迁谱线, 因塞曼能级 $2P_+$ 与 $3P_0$ 间杂化耦合, 导致其波函数混和与交换而引起的跃迁强度演变和跃迁过程属性改变。但计算获得的波函数混和状态随磁场的变化比实验观察到的要缓慢得多, 即现有理论能够预期的能态杂化和波函数混和, 与实际

观测到的结果相比较弱, 并发生在更宽的磁场和能量范围内。此外, 理论给出的“不相交”点的磁场强度也比实验值略高一些。对 $B = 10T$ 附近弱磁场下指认为 $3P_0$ 与 $4P_0$ 的两跃迁过程间的杂化混和过程, 理论与实验的不一致更为明显, 尽管实验上已观察到两谱线强度的较尖锐变化和向相反方向演变, 但理论曲线仅在原 $4P_0$ 跃迁中略见端倪。有意思的是理论给出的弱磁场下 $4P_0$ 跃迁的强度演变与实验结果(尽管较复杂)符合颇为一致。这些事实表明, 我们的方法和理论对处理弱磁场下的能态杂化和波函数混和可以取得与实验一致的结果; 但随着磁场增强, 理论与实验的偏差也增大。这一情况并不令人意外, 因为尽管我们在处理磁场效应时并未采用微扰近似, 但有效质量理论本身有其近似性和前提; 另外, 用零磁场下类氢波函数的组合来构成变分波函数, 可能也是造成强磁场下理论与实验相差较大的部份原因。看来为完全描述实验观察到的波函数混和与能态杂化结果, 尚需更完善的理论。

6 结 论

以硅中磷塞曼能级间杂化混和为例, 给出了凝聚态固体中两微观电子态间杂化混和

时波函数混和和线性组合的直接实验证据和规律。对硅中磷塞曼能级而言, 这种波函数混和是充分的, 以至“反相交”前后, 态及相关的跃迁的物理属性改变。硅中磷塞曼能态杂化和波函数混和仅发生在磁场有异于 $\langle 001 \rangle$ 及等价方向的分量的条件下, 并且在狭窄的磁场和能量范围内, 当 $\Delta E \geq 0.9 \text{ meV}$ 时, 实验观察到的 $3P_0$ 与 $2P_+$ 间的杂化混和就可以忽略不计。随磁场增强, 杂化混和发生在更窄的磁场和能量范围内, 并导致参于杂化的态的波函数间更强烈的混和与跃迁过程物理属性的较急剧变化。

有效质量模型框架下的变分计算, 可以定性和半定量地解释硅中磷塞曼能级的杂化和波函数混和现象。但为获得与实验定量符合的结果显然还需作更多工作。

- [1] M. Born and K. Huang (黄昆), *Dynamic Theory of Crystal Lattice* (Oxford Univ. Press, NY, 1954), p. 82; K. Huang (黄昆), *Proc. Roy. Soc. (London) Ser. A*, **208**(1951), 352.
- [2] S. S. Mitra and N. E. Massa, in "Handbook on Semiconductors", Ed. by W. Paul (North-Holland Publish, 1980), Vol. 1, p. 81.
- [3] 沈学础, 半导体的光学性质(北京, 科学出版社, 1992), 126, 271, 278, 320, 553, 608页.
- [4] 单伟、沈学础、朱浩荣, 物理学报, **35** (1986), 1290.
- [5] S. Jiang (姜山) and S. C. Shen (沈学础), *Phys. Rev.*, **B40**(1989), 8017.
- [6] J. N. Schulman and Y. C. Chang, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 2056.
- [7] G. Bastard, *Phys. Rev.*, **B25**(1982), 7584; **B24**(1981), 5693.
- [8] Bangfen Zhu (朱邦芬) and Kun Huang (黄昆), *Phys. Rev.*, **B36**(1987), 8102.
- [9] B. Pajot, F. Merlet, G. Taravalla and Ph. Arcas, *Can. J. Phys.*, **50**(1972), 1106; **50**(1972), 2108.
- [10] S. Zwerdling, K. J. Button and B. Lax, *Phys. Rev.*, **118**(1960), 975.
- [11] S. C. Shen (沈学础), 8th Intern' Conf. on FTS (1991), SPIE Vol. **1575**, p. 161.
- [12] Y. M. Mu (穆耀明), J. P. Peng (彭建平), P. L. Liu (刘普林), S. C. Shen (沈学础) and J. P. Zhu (朱景兵), *Phys. Rev.*, to be published.
- [13] 沈学础、褚君浩, 物理学报 **34** (1985), 56.
- [14] C. H. Henry and J. J. Hopfield, *Phys. Rev. Lett.*, **15**(1965), 964.
- [15] G. Livescu and O. Brafman, *Solid Stat. Commun.*, **35**(1980), 73.
- [16] G. Abstreiter, R. Huber, G. Trankle and B. Vinter, *Solid Stat Commun.*, **47**(1983), 651.
- [17] G. Abstreiter, R. Trommer, M. Cardona and A. Pinczuk, *Solid Stat Commun.*, **30**(1979), 703.
- [18] Z. Y. Yu (俞志毅), Y. X. Huang (黄叶肖) and S. C. Shen (沈学础), *Phys. Rev.*, **B39**(1989), 6287; *Appl. Phys. Lett.*, **55**(1989), 2084.
- [19] 俞志毅、黄叶肖、朱景兵、陆卫、沈学础, 科学通报, **35** (1990), 173.
- [20] S. C. Shen (沈学础), Z. Y. Yu (俞志毅) and Y. X. Huang, *Intern' J. IR and mm Waves*, **11** (1990), 595.
- [21] R. A. Faulkner, *Phys. Rev.*, **184**(1969), 713.

WAVEFUNCTION MIXTURE AND COMPOSITION FOR HYBRIDIZED ZEEMAN STATES OF P IN Si

SHEN XUE-CHU ZHU JING-BING MU YAO-MING LIU PU-LIN

(State Key Laboratory for Infrared Physics, Shanghai Institute of Technical

Physics, Academia Sinica, Shanghai 200083)

(Received 17 August 1993)

ABSTRACT

We report direct experimental determination of the wavefunction mixture and composition for hybridized Zeeman states of P in Si. The intensity evolution of the Zeeman transitions nearby anti-crossing region for the isolated P donors in high pure Si has been measured quantitatively by use of high sensitive and high resolution photothermal ionization spectroscopy (PTIS); The wavefunction compositions and their evolutions upon magnetic field for the hybridized Zeeman states of bounded electrons of impurities have been deduced from the measurement. A variational calculation under the frame of effective mass approach has been performed to estimate theoretically the wavefunction composition. The results are compared with experimental ones.

PACC: 7850; 7155; 7170