

束縛施主电子与 Si^{29} 核超精細作用的各向異性*

張 綺 香

提 要

本文利用 Si 中浅能级施主的有效质量波函数, 计算了束縛施主电子与 Si^{29} 核超精細作用的等效自旋哈密頓量。超精細作用中不同谷的 Bloch 函数之间, 相干效应非常明显, 超精細作用的各向異性主要是由谷间相干效应决定的。在强場近似下求出了 Si^{29} 核的核磁共振频率的表示式, 定量地解释了 Feher^[3] 的实验结果, 并且可以由实验定出谷间磁偶极相互作用矩阵元。从正交平面波的观点出发进行了计算, 与实验结果比较定出了导带底布洛赫函数中 2P 心态波函数的组合系数的大小为 0.20。指出了利用双共振方法及其压力效应有可能测定导带底的波矢及有效质量波函数的各向異性分布。

一、引 言

近几年来, 在利用自旋共振研究半导体的性质, 特别是对杂质束縛电子的自旋共振方面进行了一系列的工作^[1,2], 对于进一步了解半导体的杂质状态及能带结构等方面提供了一定结果。Feher 系统地研究了 Si 中浅施主能级的自旋共振现象^[3-5]。他利用双共振的技术测定了 Si^{29} 核的核磁共振频率, 由此定出 Si^{29} 核与电子的各向異性超精細作用, 由所测量的结果可以看出, 对于距杂质核不同距离及相同距离不同位置的等价格点, 超精細作用的各向異性都是不同的。Feher 通过对各向同性的费米接触作用的分析, 得到了不同格点处杂质波函数的分布, 由于此分布受相干因子($e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_n}$)所調幅(其中 \mathbf{k}_j 为 Si 晶体中第 j 个导带底的波矢, \mathbf{r}_n 为第 n 个 Si^{29} 核格点的位置)。所以在 \mathbf{r}_n 格点处, 电子云的分布强度灵敏地依赖于导带底的波矢, 通过理論分析与实验对比可以定出导带底的波矢。但对各向異性的磁偶极作用項, 却没有能够具体分析引起各向異性分裂的物理原因。

本文着重分析了 Si^{29} 核与束縛施主电子磁偶极作用的等效自旋哈密頓量, 并希望通过这个分析能得到有关 Si 导带底的波函数及杂质波函数的一些知識。由已有的实验事实說明, 浅施主基态波函数, 除去在杂质核附近外, 都可以用适当修正的有效质量近似波函数来描述^[6]。我們利用 Kohn 和 Luttinger 的有效质量波函数, 推导出电子与核自旋系統的等效自旋哈密頓量, 在 Si 中, 浅施主电子波函数是由导带底六个谷的谷軌道的綫性組合組成。所以在电子与 Si^{29} 核的超精細作用中, 应该明显反映谷间相干效应, 对磁偶极相互作用項, 谷间相干效应尤其不能忽略, 事实上主要是由磁偶极作用中的谷间相干效

* 1964 年 6 月 3 日收到。

应, 决定了相同距离不同位置的 Si^{29} 核与电子间超精细作用的各向异性分裂。我们得到的结果很好地说明了实验事实。并且通过和实验数据比较, 分析了导带底波函数的组成成分; 另一方面, 分析了通过双共振实验可以测定导带底偏离布里渊区特殊点的波矢, 及杂质波函数的各向异性分布等等。

最后, 我们讨论了加单轴压力下的双共振实验, 由于加单轴压力后, 对称性改变, 各个导带底的能量简并被解除, 基态各个谷轨道的组合系数发生变化, 从而使基态与 Si^{29} 核的超精细作用中费米接触项及偶极相互作用项均改变, 在高压极限情况下, 可以最简单地定出导带底的波矢。

二、超精细作用的各向异性

1. 有效质量近似下的等效自旋哈密顿量

现在处理的系统为 Si 中掺 V 族施主杂质 P, As, Sb 的情况 (见图 1)。在低温 (1.25°K)

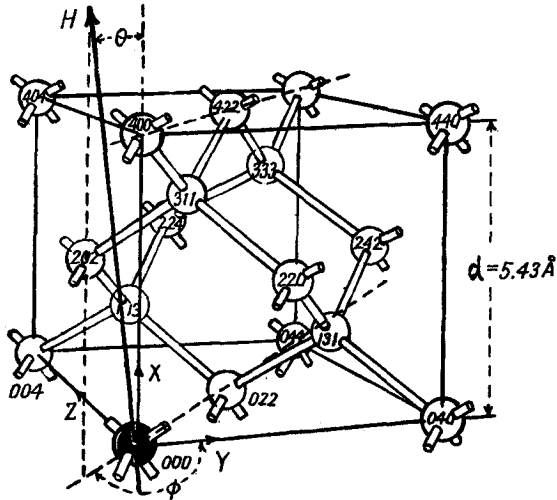


图 1 在硅晶体中替代式施主杂质及其附近格点分布, 外加磁场 \mathbf{H} 在 (011) 面内旋转方向用 (θ, ϕ) 标志

及低浓度 ($\leq 10^{17}\text{cm}^{-3}$) 时, 施主电子处于束缚态。束缚的施主电子与杂质核之间有超精细作用, 包括费米接触项, 磁偶极相互作用, 以及电四极矩的作用。但对于自旋等于 $1/2$ 的杂质核, 如 P 核, 则没有电四极矩作用。由于束缚电子基态波函数具有以杂质核为中心的四面体对称, 所以电子自旋与杂质核的磁偶极作用及电子轨道磁矩与杂质核磁矩的作用均为零。因此, 在束缚电子与杂质核之间, 只存在各向同性的费米接触作用。Si 晶体中天然存在丰度为 4.7% 的 Si^{29} 同位素, 其核自旋为 $1/2$, 束缚施主电子与其涉及范围内的 Si^{29} 核的超精细作用和杂质核的情况有所不同, 由于 Si^{29} 核附近电子云分布并非四面体对称, 所以存在电子自旋与 Si^{29} 核磁矩之间的磁偶极相互作用, 此外, 由于电子轨道磁矩和 Si^{29} 核磁矩的相互作用为零 (具体证明见附录 I), 所以我们不再把相应的项写出来。本节就是讨论如何描述引起超精细作用各向异性分裂的磁偶极相互作用的问题。

在外加磁场 \mathbf{H} 作用之下, 系统的自旋哈密顿量为

$$\begin{aligned}
 H = & \mathcal{H}_z - \mu_D \cdot \mathbf{H} - \sum_n \mu_n \cdot \mathbf{H} + \frac{8\pi}{3} \mu_c \cdot \mu_D |\psi(0)|^2 + \\
 & + \frac{8\pi}{3} \sum_n \mu_c \cdot \mu_n |\psi(\mathbf{r}_n)|^2 - \sum_n \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^3} \left\{ \mu_c \cdot \mu_n - \right. \\
 & \left. - \frac{3[\mu_c \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)][\mu_n \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^2} \right\}, \quad (1)
 \end{aligned}$$

其中 \mathcal{E}_s 为电子的塞曼能; μ_e, μ_D, μ_n 分别为自旋磁矩、杂质核自旋磁矩、Si²⁹ 核自旋磁矩; $|\psi(0)|^2$ 为在杂质核处电子云的分布, $|\psi(\mathbf{r}_n)|^2$ 为在第 n 个 Si²⁹ 核处电子云的分布. 第二项为杂质核磁矩与外磁场的相互作用, 第三项为 Si²⁹ 核磁矩与外磁场的相互作用, 第四项为电子与杂质核的费米接触作用, 第五项为电子与 Si²⁹ 核的费米接触作用, 第六项为电子自旋与 Si²⁹ 核的磁偶极相互作用, 求和是对束缚电子所涉及范围内的所有 Si²⁹ 核格点求和.

我们采用 Kohn 和 Luttinger 的有效质量近似的波函数, Si 中浅能级施主杂质的基态波函数为

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_i F^i(\mathbf{r}) \phi^i(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{6}} \sum_i F^i(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}_0^i} \cdot \exp(i\mathbf{k}_0^i \cdot \mathbf{r}), \quad (2)$$

其中 $\phi^i(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}_0^i} \exp(i\mathbf{k}_0^i \cdot \mathbf{r})$ 为 Si 中第 j 个导带底的布洛赫波函数, 求和是对 Si 的六个等价的导带谷求和 ($j = 1, 2, 3, \dots, 6$). $F^i(\mathbf{r})$ 为解有效质量方程求出的有效质量波函数.

将系统的自旋哈密顿量, 在波函数(2)间进行平均, 求出等效自旋哈密顿量为

$$\begin{aligned} \mathfrak{H} = & \beta \mathbf{S} \cdot \mathfrak{G} \cdot \mathbf{H} - \mu_D \cdot \mathbf{H} - \sum_n \mu_n \cdot \mathbf{H} + \\ & + \frac{8\pi}{3} \mu_e \cdot \mu_D |\psi(0)|^2 + \frac{8\pi}{3} \sum_n \mu_e \cdot \mu_n |\psi(\mathbf{r}_n)|^2 - \sum_n \mu_e \cdot \mathfrak{P}_n \cdot \mu_n, \end{aligned} \quad (3)$$

其中 β 为玻尔磁子; \mathfrak{G} 为施主电子的有效 g 因子; \mathbf{S} 为电子自旋算符, 第一项为等效的塞曼项; 其余几项的物理意义与(1)式相同, 但必须注意到在超精细作用中, μ_e 只是自由电子的自旋磁矩, 与塞曼项中的有自旋轨道耦合混入的有效 g 因子不同. 最后一项为磁偶极相互作用的二阶张量项:

$$\begin{aligned} \mathfrak{P}_n = & \left\langle \psi(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^3} - \frac{3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^5} \right| \psi(\mathbf{r}) \right\rangle = \\ = & \frac{1}{6} \sum_{ij} \langle F^i(\mathbf{r}) \phi^i(\mathbf{r}) | \mathfrak{H}_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_n} | F^j(\mathbf{r}) \phi^j(\mathbf{r}) \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

通过傅里叶变换简化二阶张量项(4)¹⁾, 在这里只提一下方法和结果.

对偶极相互作用进行傅里叶变换:

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^3} - \frac{3(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^5} = \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{d\mathbf{q}}{q^2} e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)} \cdot \left[\mathbf{q}\mathbf{q} - \frac{1}{3} q^2 \right], \quad (5)$$

对有效质量波函数 $F^i(\mathbf{r})$ 进行傅里叶变换:

$$F^i(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} f^i(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad (6)$$

将周期函数对倒格矢进行展开:

$$u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_n a_n(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{-i\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r}}, \quad (7)$$

\mathbf{K}_n 为倒格矢. 将(5), (6), (7)式代入(4)式进行运算, 把倒格矢等于零的项与不等于零

1) 此部分的处理方法详见文献[7].

的項分开,再由“动量”空間变回到“坐标”空間,得到下列簡化結果:

$$\begin{aligned} \Psi_n = & \frac{1}{6} \left\{ \sum_j \langle F^j(\mathbf{r}) | \mathfrak{H}_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_n} | F^j(\mathbf{r}) \rangle + \right. \\ & + \sum_{ij} |F^i(\mathbf{r}_n) F^j(\mathbf{r}_n)| \langle \phi^i(\mathbf{r}) | \mathfrak{H}_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_n} | \phi^j(\mathbf{r}) \rangle + \\ & \left. + \sum_{ij} i(\nabla_{\mathbf{r}} |F^i(\mathbf{r}) F^j(\mathbf{r})|)_{\mathbf{r}_n} \langle (\nabla_{\mathbf{k}} \phi_k^i(\mathbf{r})) \mathbf{k}_j^i | \mathfrak{H}_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_n} | \phi^j(\mathbf{r}) \rangle \right\}. \quad (8) \end{aligned}$$

由(8)式可以看出,其中共包括三种类型的項. 第一种是由 $n=0$ 的項推出, 它的物理意义是很清楚的, 在距离格点 \mathbf{r}_n 較远处, $|F^i(\mathbf{r}) F^j(\mathbf{r})| \cdot \mathfrak{H}_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_n}$ 为緩变函数, 我們可以把(4)式的被积函数先对每一个原胞求平均, 在元胞內略去其变化, 将 $|F^i(\mathbf{r}_n) F^j(\mathbf{r}_n)| \mathfrak{H}_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_n}$ 提到积分号外, 积分号內求平均的量为 $\frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} \phi^i \phi^j d\tau = \delta_{ij}$, 然后再对整个空間求积(去掉包括 \mathbf{r}_n 格点的元胞, 所以保証积分是收敛的). 这样就得到(8)式中的第一項; 第二項是由 $n \neq 0$ 的項推出的, 事实上, 由于 $\mathfrak{H}_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_n}$ 是一个随 $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_n|$ 增加而迅速減小的項, 在它有明显值的范围内(約一个原子大小), $F^i(\mathbf{r})$ 可以認为是不变的, 将 $F^i(\mathbf{r}_n)$ 提到积分号外, 积分号內就变成只对谷間布洛赫函数的偶极相互作用求积; 第三項是相当于考虑到 $F^i(\mathbf{r})$ 在这个范围内还有一些变化, 只取到它对 $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_n|$ 展开的一級近似結果. 从以上这三項的物理意义的說明, 可以明显地看出, 第一項相对于第二項为 $\left(\frac{a}{a^*}\right)^3$ ($\sim 10^{-6}$, 其中 a^* 是有效質量波函数的有效玻尔半径; a 是原子波函数的玻尔半径); 第三項相对于第二項为 $\frac{a}{a^*}$

($\sim 10^{-2}$). 在以下計算中忽略掉第一項及第三項, 只考虑第二項, 第二項很类似于一个費米接触項, 即我們所得到的等效自旋哈密頓量只包括有效質量函数在 \mathbf{r}_n 点的数值, 特別值得注意的是, 在这里不仅包括有同一个谷的布洛赫函数对 $\mathfrak{H}_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_n}$ 的矩陣元, 也包括有不同谷間的布洛赫函数的偶极作用矩陣元, 沒有理由認为不同谷間項比同一谷間項小, 显然它們是同一数量級的, 必須同样認真地分析. 每一对谷間偶极相互作用矩陣元, 是一个

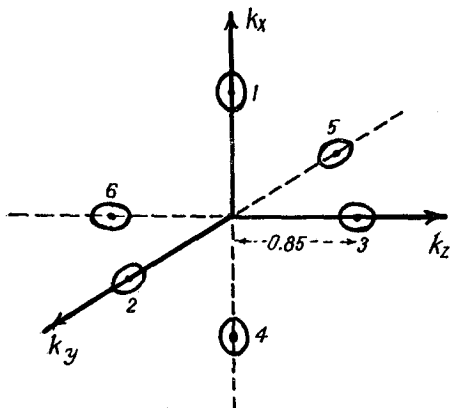


图2 Si 中六个等价导带底在第一布里淵区中的位置

二阶张量, 考虑谷內及谷間共有 36 个二阶张量項, 以下利用波函数的对称性簡化这些二阶张量, 然后再将其总合的結果求出.

先考虑 $(i=j)$ 的項, 即同一谷內項, 利用这个谷的布洛赫函数的对称操作, Si 的导带底是在 Δ 軸上[如图 2 所示], 波函数的对称性属于 Δ_1 表示, 它对于 Δ 軸的所有对称操作均保持不变^[9], 考虑 $\mathfrak{H}_{\mathbf{r}-\mathbf{r}_n}$ 是以第 n 个 Si²⁹ 核格点 \mathbf{r}_n 为原点, 整个被积函数只在 C_{2v} 羣的操作下不变, 如选 \mathbf{r}_n 为原点, 将 K_x 軸选在 Δ 軸方向; K_y, K_z 軸为垂直于 Δ 軸的两个相互垂直的軸. 在以上坐标系的选择及 C_{2v} 羣的操作下, 二阶张量只有三个独立参量^[8]. 現以第“1”个谷內偶极矩陣元为例, 其具体形式如下:

有三个独立参量^[8]. 現以第“1”个谷內偶极矩陣元为例, 其具体形式如下:

$$\langle u_{\mathbf{k}_0^1}(\mathbf{r}) | \mathfrak{H}_r | u_{\mathbf{k}_0^i}(\mathbf{r}) \rangle = \begin{pmatrix} b_1 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & b_{23} \\ 0 & b_{23} & b_2 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= \left\langle u_{\mathbf{k}_0^1}(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3XX}{r^5} \right| u_{\mathbf{k}_0^1}(\mathbf{r}) \right\rangle, \\ b_2 &= \left\langle u_{\mathbf{k}_0^1}(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3YY}{r^5} \right| u_{\mathbf{k}_0^1}(\mathbf{r}) \right\rangle, \\ b_{23} &= \left\langle u_{\mathbf{k}_0^1}(\mathbf{r}) \left| \frac{-3YZ}{r^5} \right| u_{\mathbf{k}_0^1}(\mathbf{r}) \right\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

对其余五个谷有类似于(9)式的表示式,将其分别求出后变到统一的坐标系再求和. 在这里要注意到六个谷的独立参量之间存在有相互对应的关系,在 1, 2, 3 谷之间及 4, 5, 6 谷之间有 C_3 操作变换;在 1, 2, 3 分别与 4, 5, 6 之间有 C_2 操作变换,所以将其间对应关系找出后,只保留有三个独立参量,如(10)式所示. 将所有谷内偶极相互作用矩阵元相加后,非对角元相互抵消,只剩对角元. 现引入符号 $\langle i, j \rangle$ 表示 \mathfrak{P}_n 中第 i 个谷轨道与第 j 个谷轨道之间的偶极相互作用矩阵元, $F^{i,j}$ 表示 $|F^i(\mathbf{r}_n)F^j(\mathbf{r}_n)|$, 则相同谷间偶极相互作用矩阵元的总和是

$$\begin{aligned} \sum_j \langle i, j \rangle &= \frac{1}{6} \sum_j F^{i,j} \langle u_{\mathbf{k}_0^i}(\mathbf{r}) | \mathfrak{H}_r | u_{\mathbf{k}_0^j}(\mathbf{r}) \rangle = \\ &= \frac{1}{3} \begin{pmatrix} F^{11}b_1 + (F^{22} + F^{33})b_2 & 0 & 0 \\ 0 & F^{22}b_1 + (F^{33} + F^{11})b_2 & 0 \\ 0 & 0 & F^{33}b_1 + (F^{11} + F^{22})b_2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11)$$

对于不同谷间矩阵元值得注意的是,在矩阵元的两边是不同谷的布洛赫波,当选取原点在第 n 个 Si²⁹ 核格点 \mathbf{r}_n 处时,出现一个和不同谷间波矢之差与 \mathbf{r}_n 的标量积有关的相干因子项,形式如下:

$$\sum_{i,j \neq i} \langle i, j \rangle = \frac{1}{6} \sum_{i,j \neq i} F^{ij} e^{i(\mathbf{k}_0^j - \mathbf{k}_0^i) \cdot \mathbf{r}_n} \langle \phi^i | \mathfrak{H}_r | \phi^j \rangle, \quad (12)$$

其中 $e^{i(\mathbf{k}_0^j - \mathbf{k}_0^i) \cdot \mathbf{r}_n}$ 为相干因子,在(12)式中,积分号前有相干效应的有效质量函数,可以区别不同距离及相同距离不同取向的等价格点的电子云的分布,不同谷的布洛赫函数之间的偶极相互作用矩阵元,反映着带边波函数的特点.

具体考虑相对谷间矩阵元,即 \mathbf{k}_i 和 $-\mathbf{k}_j$ 对谷间的项,如图 2 所示,这样的对共有三对,即 $\langle 1, 4 \rangle$, $\langle 2, 5 \rangle$, $\langle 3, 6 \rangle$. 由于相对谷是在同一个轴的两边,又 C_{2v} 为双轴操作,在沿 C_2 轴正、反方向均为同一操作,所以在对谷问题中仍可用 C_{2v} 操作来简化. 现以 $\langle 1, 4 \rangle + \langle 4, 1 \rangle$ 为例:

$$\begin{aligned} \langle 1, 4 \rangle + \langle 4, 1 \rangle &= \\ &= \frac{1}{6} \left\{ F^{14} e^{i(\mathbf{k}_0^4 - \mathbf{k}_0^1) \cdot \mathbf{r}_n} \left\langle \phi^1 \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^5} \right| \phi^4 \right\rangle + \right. \\ &\quad \left. + F^{41} e^{i(\mathbf{k}_0^1 - \mathbf{k}_0^4) \cdot \mathbf{r}_n} \left\langle \phi^4 \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^5} \right| \phi^1 \right\rangle \right\} = \\ &= \frac{1}{3} F^{11} \text{Re} \left[e^{i(\mathbf{k}_0^4 - \mathbf{k}_0^1) \cdot \mathbf{r}_n} \left\langle \phi^1 \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^5} \right| \phi^4 \right\rangle \right], \end{aligned} \quad (13)$$

这里

$$\langle \phi^1(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3\mathbf{r}\mathbf{r}}{r^5} \right| \phi^4(\mathbf{r}) \rangle = \begin{pmatrix} b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_4 & b_5 \\ 0 & b_5 & b_4 \end{pmatrix}, \quad (14)$$

其中独立参量的定义为

$$\left. \begin{aligned} b_3 &= \left\langle \phi^1 \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3xx}{r^5} \right| \phi^4 \right\rangle, \\ b_4 &= \left\langle \phi^1 \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3yy}{r^5} \right| \phi^4 \right\rangle, \\ b_5 &= \left\langle \phi^1 \left| -\frac{3yz}{r^5} \right| \phi^4 \right\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

利用绕 z 轴的 C_2 操作, 可以得到下列关系式:

$$\begin{pmatrix} b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_4 & -b_5 \\ 0 & -b_5 & b_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_3^* & 0 & 0 \\ 0 & b_4^* & b_5^* \\ 0 & b_5^* & b_4^* \end{pmatrix}. \quad (16)$$

由(16)式可以看出, b_3, b_4 为实数, b_5 为纯虚数. 将以上关系式代入(13)式中可得以下结果:

$$\langle 1, 4 \rangle + \langle 4, 1 \rangle = \frac{1}{3} F^{11} \begin{pmatrix} b_3 \cos 2k_0 x_n & 0 & 0 \\ 0 & b_4 \cos 2k_0 x_n & i b_5 \sin 2k_0 x_n \\ 0 & i b_5 \sin 2k_0 x_n & b_4 \cos 2k_0 x_n \end{pmatrix}, \quad (17)$$

同理可求出其他两对的结果. 利用 C_3 操作变到统一的坐标系后再求和, 则相对谷间偶极相互作用矩阵元的总和为

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=-i} \langle i, j \rangle &= \frac{1}{6} \sum_{i,j=-i} F^{ij} e^{i2\mathbf{k}_0^i \cdot \mathbf{r}_n} \langle \phi^i | \mathcal{H}_r | \phi^j \rangle = \\ &= \frac{1}{3} \begin{bmatrix} F^{11} b_3 \cos 2k_0 x_n + b_4 (F^{22} \cos 2k_0 y_n + F^{33} \cos 2k_0 z_n), i F^{33} b_5 \sin 2k_0 z_n, \\ i F^{22} b_5 \sin 2k_0 y_n, \\ i F^{33} b_5 \sin 2k_0 z_n, F^{22} b_3 \cos 2k_0 y_n + b_4 (F^{11} \cos 2k_0 x_n + F^{33} \cos 2k_0 z_n), \\ i F^{11} b_5 \sin 2k_0 x_n, \\ i F^{22} b_5 \sin 2k_0 y_n, i F^{11} b_5 \sin 2k_0 x_n, F^{33} b_3 \cos 2k_0 z_n + b_4 (F^{11} \cos 2k_0 x_n + \\ + F^{22} \cos 2k_0 y_n), \end{bmatrix} \quad (18) \end{aligned}$$

对于交叉谷间矩阵元, 不再能够利用空间群中一个固定 \mathbf{k} 的波矢量操作, 只能考虑在六个等价的波矢 \mathbf{k}_0^i 之间的 K^* 群的操作^[12] (即相当于点群与波矢群的商群), 利用此操作简化交叉谷间矩阵元. 现以“1”谷与“2”谷之间的矩阵元为例:

$$\langle 1, 2 \rangle + \langle 2, 1 \rangle = \frac{1}{3} F^{12} \text{Re} [e^{i(\mathbf{k}_0^1 - \mathbf{k}_0^2) \cdot \mathbf{r}_n} \langle \phi^1 | \mathcal{H}_r | \phi^2 \rangle], \quad (19)$$

这里

$$\langle \phi^1 | \mathcal{H}_r | \phi^2 \rangle = \begin{pmatrix} b_6 & b_8 & b_9^* \\ b_8 & b_6^* & b_9 \\ b_9^* & b_9 & b_7 \end{pmatrix}, \quad (20)$$

其中各独立参量的定义为

$$\left. \begin{aligned} b_6 &= \left\langle \phi^1 \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3xx}{r^5} \right| \phi^2 \right\rangle, \\ b_7 &= \left\langle \phi^1 \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3zz}{r^5} \right| \phi^2 \right\rangle, \\ b_8 &= \left\langle \phi^1 \left| -\frac{3xy}{r^5} \right| \phi^2 \right\rangle, \\ b_9 &= \left\langle \phi^1 \left| -\frac{3yz}{r^5} \right| \phi^2 \right\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (21)$$

考虑在 \mathbf{x} 轴与 \mathbf{y} 轴之间的交叉谷共有四对, 即 $\langle 1, 2 \rangle$, $\langle 1, 5 \rangle$, $\langle 4, 2 \rangle$ 和 $\langle 4, 5 \rangle$, 这四对之间的关系是通过绕 \mathbf{x} 轴的 C_2 操作将 $\langle 1, 2 \rangle$ 变换为 $\langle 1, 5 \rangle$; 通过绕 \mathbf{y} 轴的 C_2 操作将 $\langle 1, 2 \rangle$ 变换为 $\langle 4, 2 \rangle$; 通过绕 \mathbf{z} 轴的 C_2 操作将 $\langle 1, 2 \rangle$ 变换为 $\langle 4, 5 \rangle$. 在各对之间的对角矩阵元彼此相等:

$$\left. \begin{aligned} b_6^{12} &= b_6^{15} = b_6^{45} = b_6^{42} = b_6, \\ b_7^{12} &= b_7^{15} = b_7^{45} = b_7^{42} = b_7; \end{aligned} \right\} \quad (22)$$

而各对之间的非对角矩阵元的关系为

$$\left. \begin{aligned} b_8^{12} &= -b_8^{15} = -b_8^{42} = -b_8^{45} = b_8, \\ b_9^{12} &= b_9^{15} = -b_9^{42} = -b_9^{45} = b_9, \\ b_9^{*12} &= -b_9^{*15} = b_9^{*42} = -b_9^{*45} = b_9^*. \end{aligned} \right\} \quad (23)$$

此外 b_6 为实数, b_9 为纯虚数. 利用以上关系式得到 \mathbf{x} 轴与 \mathbf{y} 轴之间的四对交叉谷间矩阵元的和为

$$\frac{4}{3} F^{12} \text{Re} \begin{bmatrix} b_6 \cos k_0 x_n \cos k_0 y_n & b_8 \sin k_0 x_n \sin k_0 y_n & i b_9 \cos k_0 x_n \sin k_0 y_n \\ b_8 \sin k_0 x_n \sin k_0 y_n & b_6 \cos k_0 x_n \cos k_0 y_n & i b_9 \sin k_0 x_n \cos k_0 y_n \\ i b_9 \cos k_0 x_n \sin k_0 y_n & i b_9 \sin k_0 x_n \cos k_0 y_n & b_7 \cos k_0 x_n \cos k_0 y_n \end{bmatrix}. \quad (24)$$

相类似地可推出 \mathbf{x} 轴与 \mathbf{y} 轴及 \mathbf{y} 轴与 \mathbf{z} 轴之间的八对交叉谷间矩阵元, 变到统一的坐标系后再求和. 此处从略.

将通过对称操作简化后的所有二阶张量项总加在一起, 得到自旋哈密顿量中磁偶极相互作用项 \mathfrak{P}_n , 在此二阶张量中六个唯象参量与微观量之间的关系是明确而具体的.

$$\begin{aligned} \mathfrak{P}_n &= \frac{1}{6} \sum_{ij} |F^{ij}| e^{i(\mathbf{k}_0^i - \mathbf{k}_0^j) \cdot \mathbf{r}_n} \langle \phi^i | \mathcal{H}_r | \phi^j \rangle = \\ &= \begin{pmatrix} P_1 & P_4 & P_6 \\ P_4 & P_2 & P_5 \\ P_6 & P_5 & P_3 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (25)$$

其中

$$\begin{aligned}
P_1 &= \frac{1}{3} \{ [F^{11}b_1 + (F^{22} + F^{33})b_2] + [F^{11}b_3 \cos 2k_0x_n + b_4(F^{22} \cos 2k_0y_n + \\
&\quad + F^{33} \cos 2k_0z_n)] + 4\text{Re}[b_6(F^{12} \cos k_0x_n \cos k_0y_n + F^{31} \cos k_0z_n \cos k_0x_n) + \\
&\quad + b_6 + F^{23}b_7 \cos k_0y_n \cos k_0z_n] \}, \\
P_2 &= \frac{1}{3} \{ [F^{22}b_1 + (F^{33} + F^{11})b_2] + [F^{22}b_3 \cos 2k_0y_n + b_4(F^{33} \cos 2k_0z_n + \\
&\quad + F^{11} \cos 2k_0x_n)] + 4\text{Re}[(F^{12} \cos k_0x_n \cos k_0y_n + \\
&\quad + F^{23} \cos k_0y_n \cos k_0z_n)b_6 + F^{31}b_7 \cos k_0z_n \cos k_0x_n] \}, \\
P_3 &= \frac{1}{3} \{ [F^{33}b_1 + (F^{11} + F^{22})b_2] + [F^{33}b_3 \cos 2k_0z_n + b_4(F^{11} \cos k_0x_n + \\
&\quad + F^{22} \cos 2k_0y_n)] + 4\text{Re}[(F^{23} \cos k_0y_n \cos k_0z_n + F^{31} \cos k_0z_n \cdot \\
&\quad \cdot \cos k_0x_n)b_6 + F^{12}b_7 \cos k_0x_n \cos k_0y_n] \}, \\
P_4 &= \frac{1}{3} \{ F^{33}(ib_5) \sin 2k_0z_n + 4\text{Re}[F^{12}b_8 \sin k_0x_n \sin k_0y_n + \\
&\quad + F^{23}(ib_9) \cos k_0y_n \sin k_0z_n + F^{31}(ib_9) \sin k_0z_n \cos k_0x_n] \}, \\
P_5 &= \frac{1}{3} \{ F^{22}(ib_5) \sin 2k_0y_n + 4\text{Re}[F^{31}b_8 \sin k_0z_n \sin k_0x_n + \\
&\quad + F^{12}(ib_9) \cos k_0x_n \sin k_0y_n + F^{23}(ib_9) \sin k_0y_n \cos k_0z_n] \}, \\
P_6 &= \frac{1}{3} \{ F^{11}(ib_5) \sin 2k_0x_n + 4\text{Re}[F^{23}b_8 \sin k_0y_n \sin k_0z_n + \\
&\quad + F^{31}(ib_9) \cos k_0z_n \sin k_0x_n + F^{12}(ib_9) \sin k_0x_n \cos k_0y_n] \}.
\end{aligned} \tag{26}$$

通过(26)式可以看出,在磁偶极相互作用的二阶张量项中,所有非对角元都是由谷间相互作用引出的,可以看出,各向异性主要是由谷间相互作用决定。看来,除谷轨道分裂外,双共振的各向异性是第一次明显地反映谷间相互作用效应的,并且在这里谷间相互作用的形式是明显的,可以写出来,而且可以通过实验定出来的。

其次,对于不同距离及相同距离不同位置的等价的 Si^{29} 核格点与电子的磁偶极相互作用的差别,是由于有相干因子的有效质量展开函数表示出。所以各个不同格点的超精细作用的各向异性分裂是灵敏地受导带底的波矢及有效质量展开函数所影响。通过测量不同格点的各向异性分裂,有可能较灵敏地测定导带底的波矢及各向异性的有效质量展开函数。

此外,在(25)式中包括九个参量 b_1, \dots, b_9 , 由定义(10),(15),(21)式可以看出其分别为谷内及谷间偶极相互作用矩阵元,如果把布洛赫函数在 \mathbf{r}_n 点的附近用球谱函数作对称展开,则对于各种不同对称类型的球谱函数,这些矩阵元之间就有各种不同的比例关系。我们知道,在 Si 的导带底中,最主要的贡献是来自 P 函数,现将 P 函数代入到(10),(15),(21)中,得到这九个参量之间的关系:

$$\left. \begin{aligned}
b_1 &= -2b_2 = -b_3 = 2b_4 = 1.33b_8, \\
b_5 &= b_6 = b_7 = b_9 = 0.
\end{aligned} \right\} \tag{27}$$

所以有可能通过由实验定出的九个参量之间的比例关系,判断在磁偶极相互作用中是某种对称类型的波函数在起作用,从而定出此种类型波函数在布洛赫波函数中的组成成分。

2. 共振频率的表达式

假设在磁场引起的塞曼分裂大于超精细作用, 即所谓在强场情况下, 将等效自旋哈密顿量对角化, 求出能量的近似表达式:

$$\begin{aligned}
 E = & \beta g_0^* H m_s - \beta_N \gamma H M_D - \sum_n B_N \gamma' H M_n + a_D m_s M_D + \\
 & + \sum_n a_n m_s M_n - \sum_n \alpha [P_1 \cos^2 \theta + P_2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + P_3 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + \\
 & + P_4 \sin 2\theta \cos \phi + P_5 \sin 2\theta \sin \phi + P_6 \sin^2 \theta \sin 2\phi] m_s M_n, \quad (28)
 \end{aligned}$$

其中

$$a_D = \frac{8\pi}{3} \beta \beta_N g_0 \gamma |\psi(0)|^2,$$

$$a_n = \frac{8\pi}{3} \beta \beta_N g_0 \gamma' |\psi(\mathbf{r}_n)|^2,$$

$$\alpha = \beta \beta_N g_0 \gamma'.$$

其中 m_s , M_D , M_n 分别为电子, 杂质核, Si²⁹ 核的磁量子数; β , β_N 分别为电子与核的玻尔磁子; g_0^* 为施主电子的有效 g 因子; g_0 , γ , γ' 分别为自由电子, 杂质核及 Si²⁹ 核的 g 因子. (θ, ϕ) 标志磁场方向, 其坐标选择见图 1, 相当于极坐标的角度标度.

在双共振的情况下, 若只考虑 Si²⁹ 核与束缚电子的超精细作用的选择定则, 则

$$\Delta M_n = \pm 1, \quad \Delta m_s = 0, \quad \Delta M_D = 0, \quad (29)$$

第 n 个 Si²⁹ 核反向的跃迁频率为

$$\begin{aligned}
 h\nu_n^\pm = & \left| -\beta_N \gamma' H \pm \frac{1}{2} a_n \mp \frac{1}{2} \alpha [P_1 \cos^2 \theta + P_2 \sin^2 \theta \cos^2 \phi + P_3 \sin^2 \theta \sin^2 \phi + \right. \\
 & \left. + P_4 \sin 2\theta \cos \phi + P_5 \sin 2\theta \sin \phi + P_6 \sin^2 \theta \sin 2\phi] \right|. \quad (30)
 \end{aligned}$$

(30) 式为一般共振频率表示式, 可用于解释不同位置处 Si²⁹ 核格点与电子的超精细作用各向异性. 应该指出, (30) 式对不同套等价格点的具体表达式, 可以直接利用这一套格点的宏观对称性得到, 但这样就只能将唯象参量看为参量, 而实际上并不了解它的物理机构.

三、与实验结果比较

根据上节求出的共振频率表达式(30), 在 Feher^[3] 的实验条件下加以简化, 由于在实验中磁场方向是在(011)平面内变化的, 所以 $\phi = 45^\circ$, 将 ϕ 角的具体值代入, 并将与磁场有关的项移至等号的左边, 得到可以直接与 Feher 实验曲线相对比的形式:

$$\begin{aligned}
 W(\theta) = & \left| h\nu_n^\pm - \frac{\mu_{Si} H}{I_{Si}} \right| = \\
 = & \left| \pm \frac{1}{2} a_n \mp \frac{1}{2} \alpha \left[P_1 \cos^2 \theta + \frac{1}{2} P_2 \sin^2 \theta + \right. \right. \\
 & + \frac{1}{2} P_3 \sin^2 \theta + \frac{1}{\sqrt{2}} P_4 \sin 2\theta + \frac{1}{\sqrt{2}} P_5 \sin 2\theta + \\
 & \left. \left. + P_6 \sin^2 \theta \right] \right|. \quad (31)
 \end{aligned}$$

以下将不同套的等价格点的各向异性分裂的理论曲线求出,选定唯象参量,计算出随磁场方向变化的理论曲线与实验对比;另外通过唯象参量计算微观量。

1. **A 綫** 是 400 套六个等价 Si^{29} 核格点与电子的超精细作用的各向异性分裂綫。对于此套中不同的等价格点都可以用 400 的 P 值来表示,这样对于不同的等价格点 (31) 式就可以写成下列函数关系:

(1) 400 点

$$W_1^A(\theta) = \frac{1}{2} a_n^A - \frac{1}{2} \alpha [P_1^A \cos^2 \theta + P_2^A \sin^2 \theta + P_6^A \sin^2 \theta];$$

(2) 400 点

$$W_2^A(\theta) = \frac{1}{2} a_n^A - \frac{1}{2} \alpha [P_1^A \cos^2 \theta + P_2^A \sin^2 \theta - P_6^A \sin^2 \theta];$$

(3) 040, 004 点

$$W_3^A(\theta) = \frac{1}{2} a_n^A - \frac{1}{2} \alpha \left[P_2^A \cos^2 \theta + \frac{1}{2} P_1^A \sin^2 \theta + \frac{1}{2} P_2^A \sin^2 \theta + \frac{1}{\sqrt{2}} P_6 \sin 2\theta \right];$$

(4) 040, 004 点

$$W_4^A(\theta) = \frac{1}{2} a_n^A - \frac{1}{2} \alpha \left[P_2^A \cos^2 \theta + \frac{1}{2} P_1^A \sin^2 \theta + \frac{1}{2} P_2^A \sin^2 \theta - \frac{1}{\sqrt{2}} P_6^A \sin 2\theta \right], \quad (32)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} P_1^A &= \frac{1}{6} \{ [F^{11} b_1 + 2F^{22} b_2] + [F^{11} b_3 \cos 2k_0 d + 2F^{22} b_4] + 4\text{Re}[2F^{12} b_6 \cos k_0 d + F^{22} b_7] \}, \\ \frac{1}{2} P_2^A &= \frac{1}{6} \{ [F^{22} b_1 + (F^{11} + F^{22}) b_2] + [F^{22} b_3 + (F^{11} \cos 2k_0 d + F^{22}) b_4] + 4\text{Re}[F^{12} b_6 \cos k_0 d + F^{22} b_6 + F^{12} b_7 \cos k_0 d] \}, \\ \frac{1}{2} P_6^A &= \frac{1}{6} \{ 2F^{11}(i b_5) \sin 2k_0 d + 4\text{Re}[2F^{12}(i b_9) \sin k_0 d] \}. \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

若选取一套唯象参量:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} a_n^A &= 3.861 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P_1^A &= -0.027 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P_2^A &= 0.014 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P_6^A &= -0.030 \text{ Mc/sec}. \end{aligned} \right\} \quad (34)$$

代入(31)式, 得到 400 套中各不同等价格点随磁场方向变化的曲线方程, 其结果见图 3. 与实验曲线比较, 符合得相当好.

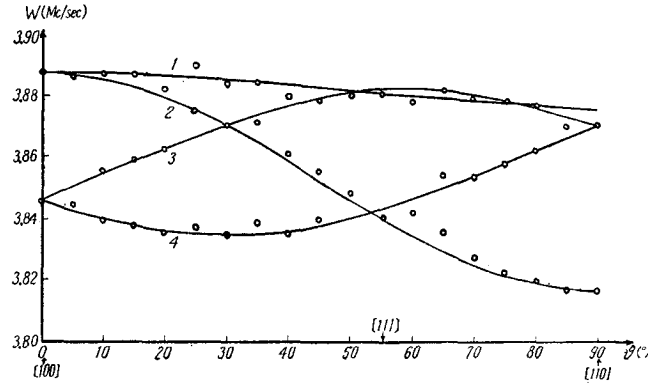


图3 A线. As 掺杂的施主电子与 400 套 Si^{29} 核的超精细作用
实线表示理论曲线; 圆点表示 Feher^[8] 的实验值, 其中每条线分别为
(1) 400; (2) 400; (3) 040, 004; (4) 040, 004
 Si^{29} 格点与电子的超精细作用

将(34)式代入(33)式计算微观量, 在这里采用 Kohn 和 Luttinger 的有效质量展开函数:

$$F^x(\mathbf{r}_n) = \frac{1}{(\pi a^2 b n^3)^{1/2}} \exp \left[- \left(\frac{Y_n^2 + Z_n^2}{(na)^2} + \frac{X_n^2}{(nb)^2} \right)^{1/2} \right]. \quad (35)$$

在 Si 晶体中各参量的值为

$$\begin{aligned} a &= 25.0 \times 10^{-8} \text{cm}, \\ b &= 14.2 \times 10^{-8} \text{cm}, \\ n &= (0.09/E_i)^{1/2}, \end{aligned}$$

E_i 是以 eV 为单位的观测的电离能, 已知 P 的电离能为 0.045 eV, As 的电离能为 0.050 eV, Sb 的电离能为 0.040 eV^[1]. n 是考虑由不同杂质有不同的电离能所引起的修正项.

导带底的波矢选取 Feher 的结果

$$k_0 = 0.85 \left(\frac{2\pi}{a} \right), \quad (36)$$

其中一些参量的选取为: 晶格常数 $d = 5.43 \text{ \AA}$, Si^{29} 核的 g 因子 $\gamma' = -0.55492$. 将 400 套格点的 $F(\mathbf{r})$ 函数的值, 相干因子及有关参量代入 (33) 式后, 得到确定 b 参量的线性方程组:

$$\left. \begin{aligned} -76.0a_0^{-3} &= 7.092b_1 + 21.52b_2 - 2.191b_3 + \\ &\quad + 21.52b_4 + 4\text{Re}(10.235b_5 + 10.71b_6), \\ 3.96a_0^{-3} &= 10.71b_1 + 17.80b_2 + 10.71b_3 + 8.52b_4 + \\ &\quad + 4\text{Re}(5.12b_6 + 10.71b_6 + 5.12b_7), \\ 8.50a_0^{-3} &= -13.49(ib_5) - 4\text{Re}(14.09ib_9), \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

1) 这里所采用的波函数(35), 是考虑了不同杂质的修正的, 所以当杂质电离能为已知的情况下, 可以将其在 Si 中的有效质量函数计算出. 由(26)式可以看出, 在右边的微观量中, 除 $F(\mathbf{r})$ 函数与杂质的特点有关外, 其他量均只与 Si 晶体的导带底的布洛赫函数有关. 若已测知一种杂质的结果, 则可将与晶体导带底布洛赫函数相联系的量定出, 再通过改变 $F(\mathbf{r})$ 函数, 可以将其他杂质的超精细作用各向异性分裂的理论曲线计算出.

其中 a_0 为玻尔半径 = 0.529 Å.

2. **B 綫** 是 440 套 12 个等价 Si^{29} 格点与电子的超精细作用各向异性分裂綫, 对于此套格点中不同的等价格点的 $W(\theta)$ 曲线为

(1) 440, 404 点

$$W_1^B(\theta) = \frac{1}{2} a_n^B - \frac{\alpha}{2} \left[P_1^B \cos^2 \theta + \frac{1}{2} (P_1^B + P_3^B) \sin^2 \theta + \frac{1}{\sqrt{2}} P_4^B \sin 2\theta + \frac{1}{\sqrt{2}} P_5^B \sin 2\theta + P_5^B \sin^2 \theta \right];$$

(2) $\bar{4}\bar{4}0, 40\bar{4}$ 点

$$W_2^B(\theta) = \frac{1}{2} a_n^B - \frac{\alpha}{2} \left[P_1^B \cos^2 \theta + \frac{1}{2} (P_1^B + P_3^B) \sin^2 \theta - \frac{1}{\sqrt{2}} P_4^B \sin 2\theta - \frac{1}{\sqrt{2}} P_5^B \sin 2\theta + P_5^B \sin^2 \theta \right];$$

(3) $\bar{4}\bar{4}0, \bar{4}0\bar{4}$ 点

$$W_3^B(\theta) = \frac{1}{2} a_n^B - \frac{\alpha}{2} \left[P_1^B \cos^2 \theta + \frac{1}{2} (P_1^B + P_3^B) \sin^2 \theta + \frac{1}{\sqrt{2}} P_4^B \sin 2\theta - \frac{1}{\sqrt{2}} P_5^B \sin 2\theta - P_5^B \sin^2 \theta \right];$$

(4) $\bar{4}\bar{4}0, \bar{4}0\bar{4}$ 点

$$W_4^B(\theta) = \frac{1}{2} a_n^B - \frac{\alpha}{2} \left[P_1^B \cos^2 \theta + \frac{1}{2} (P_1^B + P_3^B) \sin^2 \theta - \frac{1}{\sqrt{2}} P_4^B \sin 2\theta + \frac{1}{\sqrt{2}} P_5^B \sin 2\theta - P_5^B \sin^2 \theta \right];$$

(5) 044 点

$$W_5^B(\theta) = \frac{1}{2} a_n^B - \frac{\alpha}{2} [P_3^B \cos^2 \theta + P_1^B \sin^2 \theta + \sqrt{2} P_5^B \sin 2\theta + P_4^B \sin^2 \theta];$$

(6) $0\bar{4}\bar{4}$ 点

$$W_6^B(\theta) = \frac{1}{2} a_n^B - \frac{\alpha}{2} [P_3^B \cos^2 \theta + P_1^B \sin^2 \theta - \sqrt{2} P_5^B \sin 2\theta + P_4^B \sin^2 \theta];$$

(7) $0\bar{4}\bar{4}, 0\bar{4}\bar{4}$ 点

$$W_7^B(\theta) = \frac{1}{2} a_n^B - \frac{\alpha}{2} [P_3^B \cos^2 \theta + P_1^B \sin^2 \theta - P_4^B \sin^2 \theta].$$

(38)

其中各个唯象参量的表示式为

$$\frac{1}{2} P_1^B = \frac{1}{6} \{ F^{11} b_1 + (F^{11} + F^{33}) b_2 + F^{11} b_3 \cos 2k_0 d + b_4 (F^{11} \cos 2k_0 d + F^{33}) + 4 \text{Re}(F^{11} b_6 \cos^2 k_0 d + F^{23} b_7 \cos k_0 d + F^{23} b_6 \cos k_0 d) \},$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} P_3^B &= \frac{1}{6} \{ F^{33} b_1 + 2F^{11} b_2 + F^{33} b_3 + b_4 (F^{11} \cos 2k_0 d + \\ &+ F^{11} \cos 2k_0 d) + 4\text{Re}(F^{11} b_7 \cos^2 k_0 d + F^{23} b_6 \cos k_0 d + \\ &+ F^{23} b_6 \cos k_0 d) \}, \\ \frac{1}{2} P_4^B &= \frac{1}{6} \{ 4\text{Re}(F^{11} b_8 \sin^2 k_0 d) \}, \\ \frac{1}{2} P_5^B &= \frac{1}{6} \{ 4\text{Re}[F^{11}(ib_9) \cos k_0 d \sin k_0 d + F^{23}(ib_9) \times \\ &\times \sin k_0 d] + 2F^{11}(ib_5) \sin 2k_0 d \}. \end{aligned} \right\} (39)$$

若选定一套唯象参量为

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} a_n^B &= 3.001 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P_1^B &= -0.012 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P_3^B &= 0.024 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P_4^B &= -0.074 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P_5^B &= -0.039 \text{ Mc/sec}, \end{aligned} \right\} (40)$$

代入(38)式, 得到 440 套中各个不同等价格点随磁场方向的变化曲线方程, 其结果见图 4, 与实验曲线基本符合, 特别在 $\theta = 0^\circ$ 处, 044, 044, 044, 044 四条曲线应该是简并的。

将 440 套格点的有效质量展开函数, 相干因子及唯象参量的值代入(39)式后, 得到又一组确定 b 参量的线性方程组:

$$\left. \begin{aligned} -3.40 a_0^{-3} &= 6.118 b_1 + 14.66 b_2 - 1.891 b_3 + \\ &+ 6.656 b_4 + 4\text{Re}[6.373 b_6 + 4.259 b_7], \\ 6.80 a_0^{-3} &= 8.548 b_1 + 12.24 b_2 + 8.548 b_3 - \\ &- 3.780 b_4 + 4\text{Re}[2.114 b_7 + 8.517 b_6], \\ -20.96 a_0^{-3} &= 4\text{Re}[3.971 b_8], \\ -11.02 a_0^{-3} &= -11.64(ib_5) - 4\text{Re}[8.769(ib_9)]. \end{aligned} \right\} (41)$$

通过 A 线及 B 线的唯象参量, 已提供了七个独立的线性方程组, 其中共包含九个 b 参量, 利用交叉谷间对角矩阵元为零的条件:

$$b_6 = b_7 = 0 \quad (42)$$

(以下可以证明此假设是正确的), 则可以由七个线性方程求出七个 b 参量, 其结果为

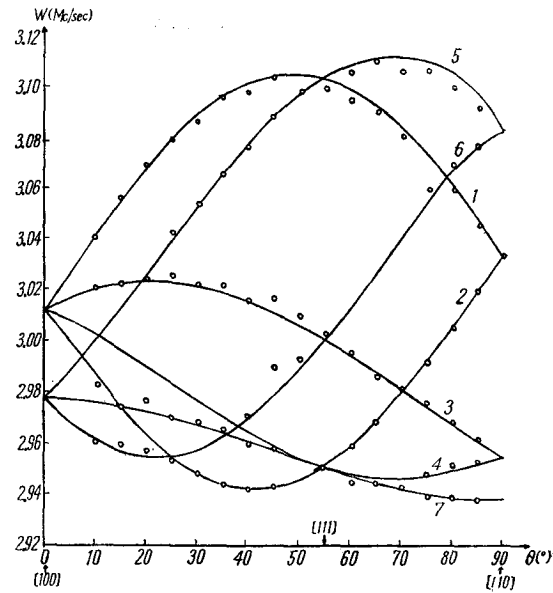


图 4 B 线. As 掺杂的施主电子与 440 套 Si^{29} 核的超精细相互作用. 其中每条线分别为 (1) 440, 404; (2) 440, 404; (3) 440, 404; (4) 440, 404; (5) 044; (6) 044; (7) 044, 044 格点. 实线为理论曲线; 圆点为 Feher^[8] 的实验结果

$$\left. \begin{aligned}
 b_1 &= -0.834 a_0^{-3}, \\
 b_2 &= 0.417 a_0^{-3}, \\
 b_3 &= 0.834 a_0^{-3}, \\
 b_4 &= -0.417 a_0^{-3}, \\
 (ib_5) &= 0.0177 a_0^{-3}, \\
 \text{Re}(ib_9) &= -0.0027 a_0^{-3}, \\
 \text{Re}(b_8) &= 1.319 a_0^{-3}.
 \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

由各个参量之间的比例关系与(27)式比较,明显地看出对矩阵元贡献主要是 P 函数,在 b_1, b_2, b_3, b_4 之间完全符合(27)式的比例关系;对 b_5 和 b_9 , P 函数的贡献为零,相当于平面波部分的贡献,由数量级可以看出,只相当于 b_1 的 10^{-2} 的数量级;但由 $\text{Re}(b_8)$ 与 b_1 的比例关系看,若只由 P 函数贡献,则此项结果过大,所以可能是由于在交叉谷间(xy)项中平面波部分的贡献较大的结果.

3. C线 和 D线 是 333 及 555 二套等价点的超精细作用的各向异性分裂曲线,由于此二套对称性相同,所以具有同样形式的理论曲线. 现以 333 套为例:

(1) 333 点

$$W_1^c(\theta) = \frac{1}{2} a_n^c - \frac{\alpha}{2} [P_1^c + \sqrt{2} P_4^c \sin 2\theta + P_4^c \sin^2 \theta];$$

(2) $\bar{3}\bar{3}\bar{3}$ 点

$$W_2^c(\theta) = \frac{1}{2} a_n^c - \frac{\alpha}{2} [P_1^c - \sqrt{2} P_4^c \sin 2\theta + P_4^c \sin^2 \theta]; \quad (44)$$

(3) $\bar{3}\bar{3}\bar{3}, \bar{3}\bar{3}\bar{3}$ 点

$$W_3^c(\theta) = \frac{1}{2} a_n^c - \frac{\alpha}{2} [P_1^c - P_4^c \sin^2 \theta].$$

选定一套唯象参量:

$$\left. \begin{aligned}
 \frac{1}{2} a_n^c - \frac{\alpha}{2} P_1^c &= 2.040 \text{ Mc/sec}, \\
 \frac{\alpha}{2} P_4^c &= -0.003 \text{ Mc/sec}.
 \end{aligned} \right\} \quad (45)$$

代入方程(44)中,可得到C线的理论曲线方程,其结果见图5.

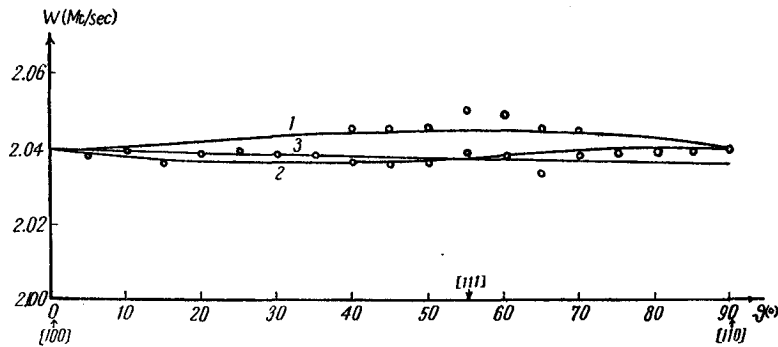


图5 C线. As 掺杂施主电子与 333 套 Si^{29} 核格点的超精细相互作用. 其中每条线分别为(1) 333; (2) $\bar{3}\bar{3}\bar{3}$; (3) $\bar{3}\bar{3}\bar{3}, \bar{3}\bar{3}\bar{3}$ 格点. 实线为理论值; 圆点为 Feher^[27] 的实验值

对 555 套格点选定一套唯象参量:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} a_n^D - \frac{\alpha}{2} P_1^D &= 1.292 \text{ Mc/sec,} \\ \frac{\alpha}{2} P_4^D &= -0.012 \text{ Mc/sec.} \end{aligned} \right\} \quad (46)$$

代入方程(44)中, 可得到 D 线的理论曲线, 其结果见图 6.

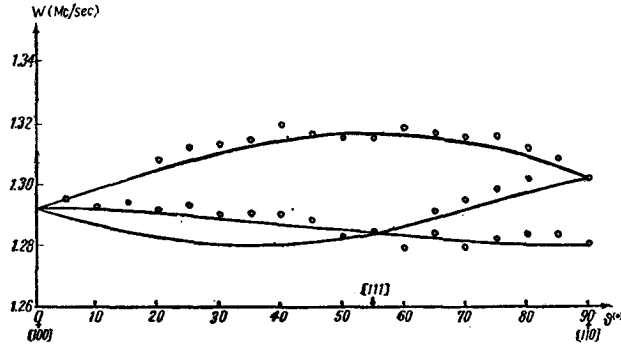


图 6 D 线. As 掺杂施主电子与 555 套 Si^{29} 核格点的超精细相互作用. 其中每条线分别为 (1) 555; (2) 555; (3) 555, 555 格点. 实线为理论值; 圆点为 Feher^[8] 的实验值

C, D 两线在原则上虽然可以提供更多的结果, 但在这里, 由于利用 A, B 两线的结果, 已将所需要的微观参量定出. 又因 C, D 两线的各向异性分裂很小, 相对误差较大, 所以可暂不利用此二线的数据, 只作为验证所得结果之用.

四、用正交化平面波计算偶极相互作用

上一节通过与实验比较定出了不同谷的布洛赫波之间的偶极相互作用矩阵元, 并且由各个矩阵元之间的关系可以分析出主要是 P 函数的贡献. 另一方面, 可以由原有的能带计算给出的 Si 的导带底的布洛赫波来计算偶极相互作用矩阵元. 通过与前节结果对比, 可以定出 P 函数的组合系数.

正交化平面波是把晶体布洛赫波函数用与晶体心态波函数¹⁾ 正交化后的平面波迭加而成, 迭加的系数根据变分原理确定. Si 的导带底位于 Δ 轴上, 布洛赫波属于 Δ_1 表示, 第一个谷的布洛赫函数为^[10,11]

$$\psi_{\mathbf{k}_0}^{\Delta_1} = \sum_{\mathbf{K}_n} a(\mathbf{k}'_0 + \mathbf{K}_n) |\mathbf{k}'_0 + \mathbf{K}_n\rangle^{\Delta_1} + \sum_i b_{\mathbf{k}'_0, i}^{\Delta_1} |\phi_{\mathbf{k}'_0, i}\rangle^{\Delta_1}. \quad (47)$$

晶体心态波函数为

$$|\phi_{\mathbf{k}'_0, i}\rangle^{\Delta_1} = \frac{1}{\sqrt{NS}} \sum_{\mathbf{R}_n} \sum_d e^{i\mathbf{k}'_0 \cdot (\mathbf{R}_n + \mathbf{d})} \chi_i^{\Delta_1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{d}),$$

其中 $\chi_i^{\Delta_1}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n - \mathbf{d})$ 为原子心态波函数, \mathbf{d} 是元胞中不同原子相对 \mathbf{R}_n 格点的位置, N 为晶体中元胞的数目, S 为元胞中原子的数目. 心态波函数的组合系数为:

$$b_{\mathbf{k}'_0, i}^{\Delta_1} = - \sum_{\mathbf{K}_n} a(\mathbf{k}'_0 + \mathbf{K}_n) B_i(\mathbf{k}'_0 + \mathbf{K}_n) \exp(i\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{d}),$$

1) 心态波函数指的是构成晶体的内层电子(非价电子)的波函数.

其中正交系数为:

$$B_i(\mathbf{k}'_0 + \mathbf{K}_n) = \sqrt{\frac{S}{\Omega_0}} \int \chi_i^{\Delta_1}(\mathbf{r}) \cdot e^{i(\mathbf{k}'_0 + \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r}.$$

Liu^[12] 曾經利用正交平面波計算了 Ge 和 Si 中自旋-軌道耦合, 得到了心态波函数的貢獻是主要的, 約占整个結果的 96%, 平面波的部分及平面波与心态交叉的部分貢獻均很小. 由于磁偶极相互作用与自旋-軌道耦合的性質是相同的, 因此可以估計在磁偶极相互作用中, 晶体心态波函数的貢獻仍然是最主要的. 在以下計算中, 只計算含心态波函数的积分, 对于心态波函数貢獻为零者再进一步考虑平面波部分的貢獻. 但对平面波的部分, 只估計了数量級的大小, 沒有进行具体計算.

Si 的导带底的对称化的心态波函数为

$$\begin{aligned} \sum_i b_{\mathbf{k}'_0, i} |\phi_{\mathbf{k}'_0, i}\rangle^{\Delta_1} &= \frac{1}{\sqrt{2N}} \left\{ b_{\mathbf{k}'_0, 1S}^{\Delta_1} \left[\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}'_0 \cdot \mathbf{R}_n} \chi_{1S}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \pm \right. \right. \\ &\pm \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}'_0 \cdot (\mathbf{R}_n + \boldsymbol{\tau})} \chi_{1S}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n + \boldsymbol{\tau}) \left. \right] + b_{\mathbf{k}'_0, 2S}^{\Delta_1} \cdot \\ &\cdot \left[\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}'_0 \cdot \mathbf{R}_n} \chi_{2S}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \pm \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}'_0 \cdot (\mathbf{R}_n + \boldsymbol{\tau})} \cdot \right. \\ &\cdot \chi_{2S}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n + \boldsymbol{\tau}) \left. \right] + b_{\mathbf{k}'_0, 2P}^{\Delta_1} \left[\sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}'_0 \cdot \mathbf{R}_n} \chi_{2P}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \pm \right. \\ &\left. \left. \pm \sum_{\mathbf{R}_n} e^{i\mathbf{k}'_0 \cdot (\mathbf{R}_n + \boldsymbol{\tau})} \chi_{2P}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n + \boldsymbol{\tau}) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (48)$$

其中 $\boldsymbol{\tau} = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right)a$. 利用(48)式計算磁偶极相互作用矩陣元, 由于考虑了磁偶极相互作用的范围很小, 可以忽略不同格点的心态波函数之間的重迭积分, 只取相同格点內的心态波函数的积分, 由于 S 函数对偶极相互作用沒有貢獻, 所以只余 $2P$ 函数对偶极相互作用有貢獻, 通过以上近似后, 得到相同及不同谷的布洛赫波間磁偶极相互作用矩陣元的近似表示式:

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= \frac{1}{2} |b_{\mathbf{k}'_0, 2P_x}^{\Delta_1}|^2 \left\langle \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3xx}{r^5} \right| \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \right\rangle, \\ b_2 &= \frac{1}{2} |b_{\mathbf{k}'_0, 2P_x}^{\Delta_1}|^2 \left\langle \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3yy}{r^5} \right| \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \right\rangle, \\ b_3 &= \frac{1}{2} |b_{\mathbf{k}'_0, 2P_x}^{\Delta_1}|^2 \left\langle \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3xx}{r^5} \right| -\chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \right\rangle, \\ b_4 &= \frac{1}{2} |b_{\mathbf{k}'_0, 2P_x}^{\Delta_1}|^2 \left\langle \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3yy}{r^5} \right| -\chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \right\rangle, \\ b_5 &= \frac{1}{2} |b_{\mathbf{k}'_0, 2P_x}^{\Delta_1}|^2 \left\langle \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \left| -\frac{3yz}{r^5} \right| -\chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \right\rangle, \\ b_6 &= \frac{1}{2} |b_{\mathbf{k}'_0, 2P_x}^{\Delta_1}|^2 \left\langle \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3xx}{r^5} \right| \chi_{2P_y}(\mathbf{r}) \right\rangle, \\ b_7 &= \frac{1}{2} |b_{\mathbf{k}'_0, 2P_x}^{\Delta_1}|^2 \left\langle \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3zz}{r^5} \right| \chi_{2P_y}(\mathbf{r}) \right\rangle, \end{aligned} \right\} \quad (49)$$

$$\left. \begin{aligned} b_8 &= \frac{1}{2} |b_{k_0, 2P_x}'|^2 \left\langle \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \left| -\frac{3xy}{r^5} \right| \chi_{2P_y}(\mathbf{r}) \right\rangle, \\ b_9 &= \frac{1}{2} |b_{k_0, 2P_x}'|^2 \left\langle \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) \left| -\frac{3yz}{r^5} \right| \chi_{2P_y}(\mathbf{r}) \right\rangle. \end{aligned} \right\}$$

利用 Woodruff^[10] 计算出的 Si 晶体导带底的晶体心态波函数的结果。其所得到的 2P 心态波函数为

$$\begin{aligned} \chi_{2P_x}(\mathbf{r}) &= \left| \frac{P_{2P}(\mathbf{r})}{r} \right| y_{10}(\theta\phi) = \\ &= [32.3954e^{-4.2r} + 55.6008e^{-7.96r}] r \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta. \end{aligned} \quad (50)$$

将它代入(49)式的矩阵元中, 进行计算的结果为

$$\left. \begin{aligned} \left\langle \chi_{2P_x} \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3xx}{r^5} \right| \chi_{2P_x} \right\rangle &= -41.1456a_0^{-3}, \\ \left\langle \chi_{2P_x} \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3yy}{r^5} \right| \chi_{2P_x} \right\rangle &= 20.5728a_0^{-3}, \\ \left\langle \chi_{2P_x} \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3xx}{r^5} \right| -\chi_{2P_x} \right\rangle &= 41.1456a_0^{-3}, \\ \left\langle \chi_{2P_x} \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3yy}{r^5} \right| -\chi_{2P_x} \right\rangle &= -20.5728a_0^{-3}, \\ \left\langle \chi_{2P_x} \left| -\frac{3yz}{r^5} \right| -\chi_{2P_x} \right\rangle &= 0, \\ \left\langle \chi_{2P_x} \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3xx}{r^5} \right| \chi_{2P_y} \right\rangle &= 0, \\ \left\langle \chi_{2P_x} \left| \frac{1}{r^3} - \frac{3zz}{r^5} \right| \chi_{2P_y} \right\rangle &= 0, \\ \left\langle \chi_{2P_x} \left| -\frac{3xy}{r^5} \right| \chi_{2P_y} \right\rangle &= -30.866a_0^{-3}, \\ \left\langle \chi_{2P_x} \left| -\frac{3yz}{r^5} \right| \chi_{2P_y} \right\rangle &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (51)$$

由于 Si 导带底的晶体心态波函数中只有 2P 函数对磁偶极相互作用有贡献, 所以计算出来各个偶极矩阵元之间的比例关系的结果与实验所得的结果(43)式符合得很好, 并且确实证明了交叉谷间对角矩阵元为零[见(42)式]的条件。对于 b_5 , b_9 由于 2P 心态波函数的贡献为零, 所以平面波部分的贡献需要考虑, 由其数量级估计, 相当于比心态部分小两个数量级左右, 与 Liu 的估计相同。但 b_8 与 b_1 的比例关系和实验结果符合得不好, 估计平面波部分对交叉谷间(xy)分量的贡献可能较大, 但还很难定量估计修正。

由以上分析可以看出, 九个参量中有六个参量只与 2P 函数的组合系数有关, 有两个参量只与平面波的组合系数有关, b_8 是与 2P 函数的组合系数及平面波的组合系数均有关的量, 所以微观参量实际上只归结为两个独立的组合系数。

通过由正交平面波计算出的矩阵元(51)与实验结果定出的 b 参量(43)对比, 可将 2P

心态波函数的组合系数定出:

$$\left. \begin{aligned} |b_{k_0, 2P_x}^1|^2 &= 0.0406 = 4.06\%, \\ |b_{k_0, 2P_x}^2|^2 &= 0.20. \end{aligned} \right\} \quad (52)$$

(52)式的结果与 Phillips^[11,13] 有关 Si 能带的计算结果基本一致。

五、束缚施主电子与 Si²⁹ 核超精细作用的压力效应

在双共振的基础上, 考虑加压力的效应。当压力不太大时, 我们采取畸变势理论近似, 并且忽略掉压力对有效质量展开函数的影响 (其数量级为超精细作用有压力下的变化/谷-轨道分裂值 $\sim 10^{-2}$)。以上近似在超精细作用中是符合得相当好的, 因此加压后相当于只有组合系数发生变化, 各个谷的轨道均不改变。

考虑沿谷轴方向 [100] 加单轴压力。由于加单轴压力, 使对称性发生变化, 各个能带谷的位移发生移动, 使原来导带谷的六重简并被解除, 从而使组合系数发生变化。Wilson 和 Feher^[5] 已经计算了在 [100] 方向加单轴压力的基态波函数:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha_j^i F^i(\mathbf{r}) \phi^j(\mathbf{r}), \quad (53)$$

其中组合系数

$$\alpha_i^j = (\alpha_A, \alpha_A, \alpha_B, \alpha_B, \alpha_B, \alpha_B), \quad (54)$$

$$\begin{aligned} (\alpha_A)^2 &= \frac{1}{4} \left[1 - \left(x + \frac{2}{3}\right) \left(x^2 + \frac{4}{3}x + 4\right)^{-1/2} \right], \\ (\alpha_B)^2 &= \frac{1}{8} \left[1 + \left(x + \frac{2}{3}\right) \left(x^2 + \frac{4}{3}x + 4\right)^{-1/2} \right], \end{aligned} \quad (55)$$

其中 $x = \frac{\mathcal{E}_u S'}{E_{12}}$, \mathcal{E}_u 为纯切应变的畸变势常数, $S' = \frac{T}{C}$, T 为张力, $C' = \frac{1}{2} (C^{11} - C^{22})$ 为弹性常数, E_{12} 为第一激发态与基态之间的能量差。

利用 (53) 式计算加单轴压力后的等效自旋哈密顿量。其方法与第二节相同, 计算结果在电子与 Si²⁹ 核的超精细作用中, 费米接触项及磁偶极相互作用项均改变, 相当于在有效质量波函数中各个谷轨道的组合系数由原 $\alpha^i = \frac{1}{\sqrt{6}} (1, 1, 1, 1, 1, 1)$ 变为 (54) 式。详细结果此处从略。在强场近似下, 共振频率的表达式形式上仍与 (30) 式相同, 只是其中费米接触项及磁偶极相互作用项中的唯象参量的定义有所改变。

对于不同套的等价格点, 由于对称性发生变化, 在每一套中, 独立参量的数目及各个格点的各向异性分裂情况均有所改变。现以 400 套格点为例, 具体分析其超精细作用随压力变化的情况。通过计算可以得到加压后 400 套中六个不同格点的 $W(\theta)$ 曲线方程:

(1) 400 点

$$W'_1(\theta) = \frac{1}{2} a'_n - \frac{\alpha}{2} [P'_1 \cos^2 \theta + P'_2 \sin^2 \theta + P'_6 \sin^2 \theta];$$

(2) 400 点

$$W'_2(\theta) = \frac{1}{2} a''_n - \frac{\alpha}{2} [P'_1 \cos^2 \theta + P'_2 \sin^2 \theta - P'_6 \sin^2 \theta];$$

(3) 040, 004 点

$$W'_3(\theta) = \frac{1}{2} a''_n - \frac{\alpha}{2} \left[P'_1 \cos^2 \theta + \frac{1}{2} P'_2 \sin^2 \theta + \frac{1}{2} P'_3 \sin^2 \theta + \frac{1}{\sqrt{2}} P'_5 \sin 2\theta \right]; \quad (56)$$

(4) 040, 004 点

$$W'_4(\theta) = \frac{1}{2} a''_n - \frac{\alpha}{2} \left[P'_1 \cos^2 \theta + \frac{1}{2} P'_2 \sin^2 \theta + \frac{1}{2} P'_3 \sin^2 \theta - \frac{1}{\sqrt{2}} P'_5 \sin 2\theta \right];$$

其中

$$\begin{aligned} a'_n &= \frac{8\pi}{3} \alpha |U^i(400)|^2 4 [\alpha_A^2 F^{11} \cos^2 k_0 d + 4\alpha_B^2 F^{22} + 4\alpha_A \alpha_B F^{12} \cos k_0 d], \\ a''_n &= \frac{8\pi}{3} \alpha |U^i(400)|^2 4 [\alpha_B^2 F^{11} \cos^2 k_0 d + (\alpha_A^2 + \alpha_B^2 + 2\alpha_A \alpha_B) \cdot F^{22} + \\ &\quad + (2\alpha_A \alpha_B + 2\alpha_B^2) F^{12} \cos k_0 d], \\ P'_1 &= 2[\alpha_A^2 F^{11} b_1 + \alpha_B^2 2F^{22} b_2] + 2[\alpha_A^2 F^{11} b_3 \cos 2k_0 d + \\ &\quad + 2\alpha_B^2 F^{22} b_4] + 8\text{Re}[2\alpha_A \alpha_B F^{12} b_6 \cos k_0 d + \alpha_B^2 F^{22} b_7], \\ P'_2 &= 2[\alpha_B^2 F^{22} b_1 + (\alpha_B^2 F^{22} + \alpha_A^2 F^{11}) b_2] + 2[\alpha_B^2 F^{22} b_3 + \\ &\quad + (\alpha_B^2 F^{22} + \alpha_A^2 F^{11} \cos 2k_0 d) b_4] + 8\text{Re}[(\alpha_A \alpha_B F^{12} \cdot \\ &\quad \cdot \cos k_0 d + \alpha_B^2 F^{22}) b_6 + \alpha_A \alpha_B F^{12} b_7 \cos k_0 d], \\ P'_6 &= 2\alpha_A^2 F^{11}(ib_5) \sin 2k_0 d + 8\text{Re}[\alpha_A \alpha_B F^{12}(ib_9) \cdot \\ &\quad \cdot \sin k_0 d + \alpha_A \alpha_B F^{12}(ib_9) \sin k_0 d], \\ P'_1 &= 2[\alpha_A^2 F^{11} b_1 + \alpha_B^2 (F^{11} + F^{22}) b_2] + 2[\alpha_A^2 F^{22} b_3 + \\ &\quad + \alpha_B^2 b_4 (F^{11} \cos 2k_0 d + F^{22})] + 8\text{Re}[(\alpha_A \alpha_B F^{12} \cdot \\ &\quad \cdot \cos k_0 d + \alpha_A \alpha_B F^{22}) b_6 + \alpha_B^2 F^{12} b_7], \\ P'_2 &= 2[\alpha_B^2 F^{11} b_1 + (\alpha_B^2 F^{22} + \alpha_A^2 F^{22}) b_2] + 2[\alpha_B^2 F^{11} b_3 \cdot \\ &\quad \cdot \cos 2k_0 d + (\alpha_B^2 F^{22} + \alpha_A^2 F^{22}) b_4] + 8\text{Re}[(\alpha_A \alpha_B F^{12} \cdot \\ &\quad \cdot \cos k_0 d + \alpha_B^2 F^{12} \cos k_0 d) b_6 + \alpha_A \alpha_B F^{22} b_7], \\ P'_3 &= 2[\alpha_B^2 F^{22} b_1 + (\alpha_A^2 F^{22} + \alpha_B^2 F^{11}) b_2] + 2[\alpha_B^2 \cdot \\ &\quad \cdot F^{22} b_3 + (\alpha_A^2 F^{22} + \alpha_B^2 F^{11} \cos 2k_0 d) b_4] + 8\text{Re}[(\alpha_A^2 \cdot \\ &\quad \cdot F^{12} \cos k_0 d + \alpha_A \alpha_B F^{22}) b_6 + \alpha_A \alpha_B F^{12} b_7 \cos k_0 d], \\ P'_5 &= 2\alpha_B^2 F^{22}(ib_5) \sin 2k_0 d + 8\text{Re}[\alpha_A \alpha_B F^{12}(ib_9) \cdot \\ &\quad \cdot \sin k_0 d + \alpha_B^2 F^{12}(ib_9) \sin k_0 d]. \end{aligned} \quad (57)$$

通过对 400 套格点的具体分析可以看出, 由于对称性变弱, 独立的唯象参量数目增加, 在平行于压力方向的参量与垂直于压力方向的参量之间不再保持有相互对应的关系, 所以总的结果相当于比原来增加了五个唯象参量, 一共有九个参量. 由(57)式可以看出, 这九个参量与微观量之间的关系是明显的, 在微观量中, 除组合系数随压力变化外, 其他各量均与未加压力时相同, 所以可以利用第三节中所求得的微观量的结果, 在加不同压力情况

下求出不同的唯象参量,从而可以得到不同的超精细作用的各向异性分裂,由此可分析出超精细作用随压力的变化.

1. 高压极限($-x \gg 1$)情况:

$$(\alpha_A)^2 = \frac{1}{2}, \quad (\alpha_B)^2 = 0. \quad (58)$$

在[100]方向加单轴压力时,由于第“1”谷与第“4”谷能量减少,其余四个谷能量升高,在大压力情况下,我们可以简单地认为杂质波函数只由“1”和“4”两个谷的函数组成,其他几个谷状态对电子态没有贡献,所以相干效应就变得简单了.在此情况下,计算出的九个唯象参量为

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} a'_n &= \frac{8\pi}{3} \alpha |U^i(400)|^2 F^{11} \cos^2 k_0 d = 0.4865 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{1}{2} a''_n &= \frac{8\pi}{3} \alpha |U^i(400)|^2 F^{22} = 1.886 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P'_1 &= \frac{\alpha}{2} (F^{11} b_1 + F^{11} b_3 \cos 2k_0 d) = -0.081 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P'_2 &= \frac{\alpha}{2} (F^{11} b_2 + F^{11} b_4 \cos 2k_0 d) = 0.042 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P'_6 &= \frac{\alpha}{2} [F^{11}(i b_5) \sin 2k_0 d] = -0.124 \text{ Mc/sec}, \\ \frac{\alpha}{2} P''_1 &= \frac{\alpha}{2} P''_2 = \frac{\alpha}{2} P''_3 = \frac{\alpha}{2} P''_5 = 0. \end{aligned} \right\} \quad (59)$$

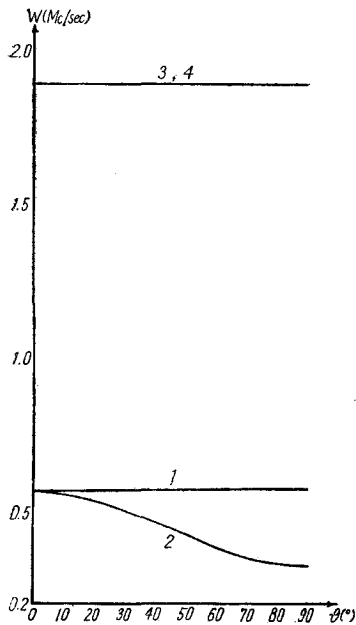


图7 在[100]方向加大压力($-x \gg 1$)情况下, As 掺杂施主电子与 400 套 Si^{29} 核格点的超精细相互作用的理论曲线. 其中各线分别为 (1) 400; (2) 400; (3) 040, 004; (4) 040, 004 格点

将(59)代入(56)式中得到大压力情况下 400 套各个格点的 $W(\theta)$ 的理论曲线, 结果见图 7. 由此可以看出, 在高压极限情况下, 费米接触作用部分为未加压时的 $\frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{8}$, 偶极相互作用引起的各向异性分裂亦减弱.

在垂直于压力方向的四个 Si^{29} 核格点不再有各向异性分裂, 只有平行于压力方向的两个格点存在有比原减弱的各向异性分裂. 此外由 (59) 式可以看出, 相干因子项以非常简单的方式存在于费米接触项及磁偶极相互作用项中, 所以利用在此极限情况下的超精细作用的结果, 特别是利用费米接触项的变化来判断导带底的波矢, 可能是最简单而又比较准确的.

2. 大拉力极限($X \gg 1$)情况:

$$(\alpha_A)^2 = 0, \quad (\alpha_B)^2 = \frac{1}{4}. \quad (60)$$

在[100]方向加单轴张力时,垂直于此方向的四个谷能量减少,平行于此方向的两个谷能量升高.在大拉力情况,我们可以简单地认为杂质波函数是由下面四个谷的函数组成的,其他两个谷状态对电子态没有贡献.

在此极限情况下, 九个唯象参量的值变为

$$\left. \begin{aligned}
 \frac{1}{2} a'_n &= \frac{8\pi}{3} \alpha |U^i(400)|^2 2F^{22} = 1.886 \text{ Mc/sec}, \\
 \frac{1}{2} a''_n &= \frac{8\pi}{3} \alpha |U^i(400)|^2 \frac{1}{2} [F^{11} \cos^2 k_0 d + F^{22} + 2F^{12} \cos k_0 d] = \\
 &= 0.5336 \text{ Mc/sec}, \\
 \frac{1}{2} \alpha P'_1 &= \frac{\alpha}{2} P'_2 = \frac{\alpha}{2} P'_6 = 0, \\
 \frac{\alpha}{2} P''_1 &= \frac{1}{4} [F^{11} b_2 + F^{11} b_4 \cos 2k_0 d] = 0.021 \text{ Mc/sec}, \\
 \frac{\alpha}{2} P''_2 &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} F^{11} b_1 + \frac{1}{2} F^{11} b_3 \cos 2k_0 d \right] = -0.041 \text{ Mc/sec}, \\
 \frac{\alpha}{2} P''_3 &= \frac{1}{4} [F^{11} b_2 + F^{11} b_4 \cos 2k_0 d] = 0.021 \text{ Mc/sec}, \\
 \frac{\alpha}{2} P''_5 &= \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} F^{11} (i b_5) \sin 2k_0 d + 2\text{Re} (F^{12} (i b_9) \sin k_0 d) \right] = \\
 &= -0.0225 \text{ Mc/sec}.
 \end{aligned} \right\} \quad (61)$$

将(61)式代入(56)式, 可得到大拉力情况下 400 套各个格点的 $W(\theta)$ 的理论曲线, 结果见图 8. 可以看出, 费米接触作用及磁偶极相互作用均减弱, 在平行于拉力方向的两个格点 Si²⁹ 核的各向异性分裂为零.

3. 加小压力(或小张力)($|x| \ll 1$)的情况:

$$\left. \begin{aligned}
 (\alpha_A)^2 &= \frac{1}{4} \left[\frac{2}{3} - \frac{4}{9} x + \frac{1}{9} x^2 \right], \\
 (\alpha_B)^2 &= \frac{1}{8} \left[\frac{4}{3} + \frac{4}{9} x - \frac{1}{9} x^2 \right], \\
 (\alpha_A \alpha_B) &= \frac{1}{6} \left[1 - \frac{1}{6} x - \frac{1}{12} x^2 \right].
 \end{aligned} \right\} \quad (62)$$

将(62)式代入(57)式, 可求出唯象参量随 x 的变化; 再将唯象参量代入(56)式, 可得到 $W(\theta)$ 随 x 的变化情况, 由此可将加小压力情况下的各向异性分裂的理论曲线画出. 详细结果此处从略. 有一点值得注意的是在加小压力的情况下, 电子与 Si²⁹ 核的超精细作用是随 x 线性变化的, 用微扰论的语言说, 相当于在此情况下有一级微扰项存在. 此与杂质核处有所不同. 在 Wilson 和 Feher^[5] 的文章中也曾提到此点.

总之, 通过压力效应, 有可能简单而又准确地定出导带底的波矢及各向异性的有效质量波函数. 另外与自旋共振的压力效应同样的可以测量激发态与基态的能量差 E_{12} .

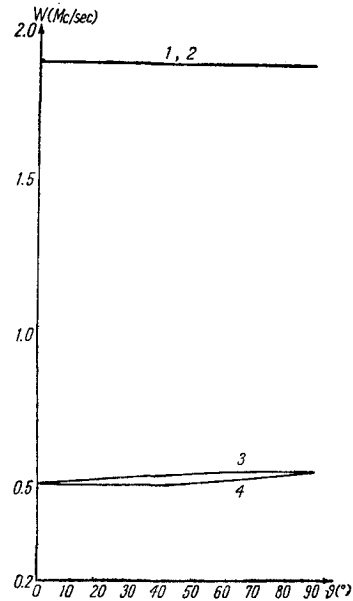


图 8 在 [100] 方向加大张力 ($x \gg 1$) 情况下, As 掺杂施主电子与 400 套 Si²⁹ 核格点的超精细相互作用的理论曲线. 其中各线分别为(1)400; (2)400; (3)040, 004; (4)040, 004 格点

六、討 論

通过束縛施主电子与 Si^{29} 核超精細作用的理論分析可以看到, 利用双共振的方法及压力效应, 对研究半导体中的杂质态及能带结构均能提供比較多的結果, 已經看到的有以下几种可能性:

1. 可以灵敏地測定杂质波函数的各向异性分布, 特别是在一种半导体材料中掺入不同杂质, 在同样条件下进行实验。由于和原材料有关的与导带底布洛赫函数相联系的数量均相同, 所以差别只是由不同杂质的有效质量波函数不同而引起的。通过对不同杂质的各向异性分裂的比較, 可以得到不同杂质的各向异性的有效质量波函数。

2. 可能判断导带底在布里渊区中的位置。由于超精細作用灵敏地受相干因子所調幅, 尤其各个等价格点的各向异性分裂, 主要是由谷間相干效应所决定, 当导带底位于布里渊区特殊点, 如 $\mathbf{k}_0 = (000)$ 或 $\mathbf{k}_0 = (111)\frac{2V}{a}$ 点时, 則等价格点的各向异性分裂为零。若偏离特殊点时, 則有明显的各向异性分裂, 并且各向异性分裂的大小灵敏地依赖于导带底的波矢。Ge 中导带底是否位于布里渊区中 $(111)\frac{2V}{a}$ 点的問題, 至今仍然沒有很严格的判別方法^[4]。我們估計利用双共振实验有可能細致地判断 Ge 中导带底的位置, 具体計算見文献[15]。

3. 可以定出导带底布洛赫波中 $l \geq 1$ 的类型的波函数的組成成分。

本文是在黃昆教授的指导下、甘子釗同志的启发和帮助下进行的, 作者在此致以深切的謝意。

附 录

証明电子軌道磁矩和 Si^{29} 核磁矩的相互作用为零。

在等效自旋哈密頓量中, 电子軌道磁矩和 Si^{29} 核磁矩的相互作用項为

$$-\sum_n \mathbf{L}_n \cdot \boldsymbol{\mu}_n = -\sum_n \left\langle \psi(\mathbf{r}) \left| \frac{\mathbf{L} \cdot \boldsymbol{\mu}_n}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^3} \right| \psi(\mathbf{r}) \right\rangle, \quad (1.1)$$

其中

$$\mathbf{L}_n = \frac{1}{6} \sum_{ij} F^i(\mathbf{r}_n) F^j(\mathbf{r}_n) e^{i(\mathbf{k}_0^i - \mathbf{k}_0^j) \cdot \mathbf{r}_n} \left\langle \phi^i(\mathbf{r}) \left| \frac{\mathbf{L}}{r^3} \right| \phi^j(\mathbf{r}) \right\rangle. \quad (1.2)$$

在角动量算符 \mathbf{L} 的作用下, 相同谷間及相对谷間的矩陣元为零, 只有交叉谷間的矩陣元有可能存在。現以 L_y 算符的作用为例, 在 L_y 算符的作用下, 只有(1,3)及(4,6)两对存在:

$$\begin{aligned} (1,3) &= \left\langle \phi^1(\mathbf{r}) \left| \frac{L_y}{r^3} \right| \phi^3(\mathbf{r}) \right\rangle = \\ &= \frac{1}{2} \left\langle f_{2P}(r) y_{1,0} \left| \frac{L_+ + L_-}{r^3} \right| f_{2P}(r) \frac{1}{\sqrt{2i}} (y_{1,1} + y_{1,-1}) \right\rangle = \\ &= i \left\langle f_{2P}(r) \left| \frac{1}{r^3} \right| f_{2P}(r) \right\rangle = (4,6) \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$(3, 1) = (6, 4) = -i \left\langle f_{2P}(r) \left| \frac{1}{r^3} \right| f_{2P}(r) \right\rangle. \quad (1.4)$$

将在 L_y 算符作用下存在的四项总加在一起, 结果为

$$(L_y)_n = \frac{1}{6} F^{13} [e^{i(\mathbf{k}_0^3 - \mathbf{k}_0^1) \cdot \mathbf{r}_n} - e^{i(\mathbf{k}_0^1 - \mathbf{k}_0^3) \cdot \mathbf{r}_n} + e^{i(\mathbf{k}_0^6 - \mathbf{k}_0^4) \cdot \mathbf{r}_n} - e^{i(\mathbf{k}_0^4 - \mathbf{k}_0^6) \cdot \mathbf{r}_n}] i \left\langle f_{2P}(r) \left| \frac{1}{r^3} \right| f_{2P}(r) \right\rangle = 0. \quad (1.5)$$

同理可推出 L_x , L_z 算符的作用亦为零。因此得到角动量部分对超精细作用的贡献为零的结果。

参 考 文 献

- [1] Feher, G., *Paramagnetic Resonance*, edited by W. Low, Vol. II, 715 (1963).
- [2] Ludwig, G. W. and Woodbury, H. H., *Solid State Physics*, **13** (1962), 223.
- [3] Feher, G., *Phys. Rev.*, **114** (1959), 1219.
- [4] Feher, G. and Gere, E. A., *Phys. Rev.*, **114** (1959), 12.
- [5] Wilson, D. K. and Feher, G., *Phys. Rev.*, **124** (1961), 1068.
- [6] Kohn, W., *Solid State Physics*, **5** (1957), 257.
- [7] 甘子钊, *物理学报*, **21** (1965), 第四期.
- [8] Smith, C. S., *Solid State Physics*, **6** (1958), 175.
- [9] Koster, G. F., *Solid State Physics*, **5** (1957), 174.
- [10] Woodruff, T. O., *Phys. Rev.*, **103** (1958), 1159.
- [11] Kleinman, L. and Phillips, J. C., *Phys. Rev.*, **118** (1960), 1153.
- [12] Liu, L., *Phys. Rev.*, **126** (1962), 1317.
- [13] Roth, M., *Phys. Rev.*, **118** (1960), 1534.
- [14] Feher, G., *Proceedings International Conference on Semiconductor Physics, Prague, 1960*, p. 579.
- [15] 张绮香 (待发表).

ANISOTROPIC HYPERFINE INTERACTION OF SHALLOW DONOR ELECTRON WITH Si²⁹ NUCLEUS

CHANG YI-HSIANG

ABSTRACT

The spin Hamiltonian of the hyperfine interaction between a shallow donor and the Si²⁹ nuclei has been derived on the basis of the effective mass wave function. The interference effect between the Bloch functions of different valleys is shown to be largely responsible for the anisotropy of the electron-nuclear hyperfine interaction. An expression for the resonance frequency was derived in the high field approximation. The theory is shown to account for the experimental observations of Feher^[3] on the anisotropic hyperfine interaction quantitatively. The coefficient of the 2p core function in the OPW conduction band edge Bloch functions has been determined by comparison with Feher's results to be 0.20 approximately. It is pointed out that on the basis of the theory given, the positions of the conduction band minima and the anisotropy of the donor effective mass wave function can be precisely determined by the method of ENDOR and its pressure effects.