

Ge 中束缚施主电子的自旋共振及其各向异性线宽*

張 綺 香

提 要

本文利用 Ge 中浅施主杂质的有效质量波函数,计算了束缚电子的等效自旋哈密顿量,得到在沒有外压力及內应力情况下,仅当 Ge 的导带极值偏离 $\frac{2\pi}{a}$ [111] 点时,共振频率才是各向异性的。指出通过电子-核双共振实验可能较确切的判断 Ge 中导带极值的位置。利用畸变势理论及微扰论,计算了在一般缓变的非均匀內应力作用下,共振频率及自旋共振线宽随磁场方向各向异性变化。最后具体计算了在以拉伸法生长的晶体中和在弯曲的范性形变下,在最主要的位错类型([211]方向刃型及[110]方向螺型位错)应力场作用下自旋共振线宽的非均匀加宽,指出对于不同类型及不同取向的位错有不同的各向异性线宽。与 Wilson^[4]的实验结果比较,我们得到当位错密度小于 10^4 cm^{-2} 时,位错应力不是形成线宽的主要原因,当磁场在不同的(110)平面內旋转时,线宽将有相似各向异性。当位错密度大于 10^5 cm^{-2} 时,位错应力对线宽的贡献是主要的。这很容易由实验判断。

一、引 言

在半导体中,自旋共振的研究进行得最早和最系统的是 Si 中浅能级杂质及深能级杂质的自旋共振^[1,2],与此同时,也进行了 Ge 中各种杂质的自旋共振实验,但至今已观测到的只有 Ge 中浅能级杂质 P, As, Sb 及深能级杂质 Ni 与 Mn 的自旋共振^[3,4]。在 Ge 中杂质电子自旋共振的特点是存在有较宽各向异性线宽,所以一般测量比较困难。在强场、低温及极低的杂质浓度情况下, Wilson 作了 Ge 中浅施主杂质的自旋共振实验,研究了杂质的基态和激发态,测量了 g 因子的各向异性、自旋晶格弛豫时间以及线型和磁场取向的关系。发现线宽明显的与磁场取向有关,而且随着样品位错密度的变化,各向异性线宽有显著的变化。Wilson 指出,各向异性线宽是由于位错的非均匀应力场所产生的,并且粗略的计算了在 [111] 方向的应力作用下所引起的各向异性线宽。但实际上并没有认真的分析非均匀內应力对各向异性线宽的影响。此外,所得到的各向异性表达式也不能描述磁场在整个(110)面內转动时线宽的改变。

当內应力不均匀时,杂质在非均匀应力场中的分布本身就贡献一各向异性线宽。此外,在內应力作用下,杂质谷轨道波函数发生变化,由于 Ge 中电子 g 因子的各向异性很大,且谷轨道分裂很小,因而在较小的非均匀內应力作用下,即给出明显的电子有效 g 因子的各向异性变化。所以在 Ge 中引起非均匀线宽的因素,除施主电子与其分布范围內

* 1964年10月20日收到。

的 Ge^{73} 核的超精细作用外, 主要是非均匀内应力引起 g 因子各向异性变化所致. 假若进行电子-核双共振实验, 能够测量电子与 Ge^{73} 核的超精细作用, 从而对非均匀内应力引起超精细作用的变化、杂质波函数的分布以及 Ge 的导带底的 Bloch 波的特点可能会有进一步地了解.

本文首先计算了在有效质量近似下 Ge 中束缚施主电子的等效自旋哈密顿量, 得出若 Ge 的导带底位于第一布里渊区中 $\frac{2\pi}{a} [111]$ 点, 则共振频率为各向同性; 若偏离 $\frac{2\pi}{a} [111]$ 点, 则为各向异性. 指出利用电子-核双共振实验, 有可能准确的判断 Ge 的导带底在布里渊区中的位置. 其次, 利用畸变势理论求出了当非均匀内应力较小且变化较缓慢的情况下, 各个等价导带谷能量的变化, 用微扰论计算了谷轨道波函数的变化, 求出了在一般非均匀内应力作用下自旋共振及电子-核双共振的频率表示式. 最后具体计算了 Ge 中刃型位错及螺型位错应力场引起的各向异性线宽. 结果表明, 当位错是不同类型, 不同取向及不同密度时给出不同的各向异性线宽. 当位错密度 $\leq 10^4$ 时, 其他非均匀内应力影响仍然相当明显; 当位错密度较大时, 位错应力场的作用是主要的.

二、有效质量近似下的等效自旋哈密顿量

首先考虑在完整的 Ge 晶体中加 V 族施主杂质 (P, As, Sb) 的情况. 由于 Ge 中杂质原子的有效玻尔半径较大, 只有在杂质浓度非常小的情况下, 才有可能不考虑杂质原子之间的重迭 (一般情况要求杂质密度 $\leq 10^5 \text{ cm}^{-3}$). Wilson 的实验是在强场、低温及低杂质浓度下进行的, 施主电子处于束缚态. 束缚施主电子的基态波函数是以杂质核为中心的完全四面体对称态, 所以电子与杂质核的超精细作用只有费米接触项, 它引起线的超精细分裂; 而磁偶极和电四极作用均为零. 束缚电子和它在轨道中碰到的 Ge^{73} 核的超精细作用是引起自旋共振线宽的一个主要原因, 对 Ge^{73} 核附近电子云的分布不是四面体对称, 所以除费米接触作用外, 还有磁偶极和电四极矩作用. 下面证明, 如果 Ge 的导带底位于 $\frac{2\pi}{a} [111]$ 点, 这些项亦为各向同性. 在外加磁场 \mathbf{H} 的作用下, 系统的自旋哈密顿量为

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{H} - \boldsymbol{\mu}_D \cdot \mathbf{H} - \sum_n \boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{H} + \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_D |\psi(0)|^2 + \\ & + \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu}_e \cdot \sum_n \boldsymbol{\mu}_n |\psi(\mathbf{r}_n)|^2 - \sum_n \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^3} \left\{ \boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_n - \right. \\ & \left. - \frac{3[\boldsymbol{\mu}_e \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)][\boldsymbol{\mu}_n \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^2} \right\} + \sum_n Q' \left\{ \frac{\mathbf{I}_n \cdot \mathbf{I}_n}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^3} - \right. \\ & \left. - \frac{3[\mathbf{I}_n \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)][\mathbf{I}_n \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)]}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_n|^5} \right\}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $\boldsymbol{\mu}_e$ 、 $\boldsymbol{\mu}_D$ 、 $\boldsymbol{\mu}_n$ 分别为电子、杂质核、 Ge^{73} 核的磁矩; $|\psi(0)|^2$ 为电子在杂质核处的分布; $|\psi(\mathbf{r}_n)|^2$ 为电子在第 n 个 Ge^{73} 核处电子云的分布. 前三项分别为电子、杂质核、 Ge^{73} 核与外加磁场的相互作用; 第四、五项分别为电子与杂质核及 Ge^{73} 核的费米接触作用; 第六项为电子与 Ge^{73} 核的磁偶极作用; 第七项为电子与 Ge^{73} 核的电四极矩作用.

利用 Kohn-Luttinger 有效质量近似的波函数, 若 Ge 的导带底位于第一布里渊区中

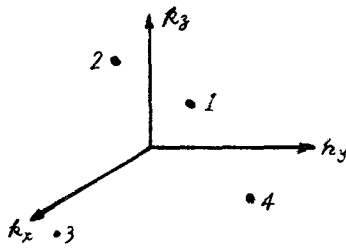


图 1 Ge 中四个等价导带底在第一布里渊区中的位置

$\frac{2\pi}{a}$ [111] 及其等价点, 则共有四个谷 (见图 1). 浅施主电子基态的有效质量波函数为

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_j F^j(\mathbf{r}) \phi^j(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{4}} \sum_j F^j(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}_0^j} e^{i\mathbf{k}_0^j \cdot \mathbf{r}_n}, \end{aligned} \quad (2)$$

其中 $j = 1, 2, 3, 4$.

在有效质量近似下, 等效自旋哈密顿量为

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \beta \mathbf{S} : \mathcal{G} : \mathbf{H} - \boldsymbol{\mu}_D \cdot \mathbf{H} - \sum_n \boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{H} + \\ &+ \frac{8\pi}{3} \boldsymbol{\mu}_c \cdot \boldsymbol{\mu}_D |\psi(0)|^2 + \frac{8\pi}{3} \sum_n \boldsymbol{\mu}_c \cdot \boldsymbol{\mu}_n |\psi(\mathbf{r}_n)|^2 - \\ &- \sum_n \boldsymbol{\mu}_c : \mathfrak{P}_n : \boldsymbol{\mu}_n + \sum_n \mathbf{I}_n : \mathcal{Q} : \mathbf{I}_n, \end{aligned} \quad (3)$$

其中

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

利用富里叶变换简化二阶张量项^[5], 略去一些较小项, 便得到准费米接触项型的磁偶极和电四极矩作用, 其结果为

$$\left. \begin{aligned} \mathfrak{P}_n &= \frac{1}{4} \sum_{ij} |F^i(\mathbf{r}_n) F^j(\mathbf{r}_n)| e^{i(\mathbf{k}_0^i - \mathbf{k}_0^j) \cdot \mathbf{r}_n} \left\langle \phi^i \left| \frac{1}{|\mathbf{r}|^3} - \frac{3\mathbf{r}\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^5} \right| \phi^j \right\rangle = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{ij} F^{ij}(\mathbf{r}_n) \langle \phi^i | \mathcal{H}_d | \phi^j \rangle, \\ \mathcal{Q}_n &= \frac{1}{4} \sum_{ij} |F^i(\mathbf{r}_n) F^j(\mathbf{r}_n)| e^{i(\mathbf{k}_0^i - \mathbf{k}_0^j) \cdot \mathbf{r}_n} \left\langle \phi^i \left| \mathcal{Q}' \left\{ \frac{1}{|\mathbf{r}|^3} - \frac{3\mathbf{r}\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|^5} \right\} \right| \phi^j \right\rangle = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{ij} F^{ij}(\mathbf{r}_n) \langle \phi^i | \mathcal{H}_q | \phi^j \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

设:

$$\mathfrak{R}_n = \mathfrak{P}_n + \mathcal{Q}_n = \frac{1}{4} \sum_{ij} F^{ij}(\mathbf{r}_n) \langle \phi^i | \mathcal{H}_d + \mathcal{H}_q | \phi^j \rangle, \quad (6)$$

利用 Ge 导带底 Bloch 函数的对称性, 简化二阶张量项 \mathfrak{R}_n . 此处需要同时考虑谷内及谷间相互作用^[6], 若 Ge 的导带底位于布里渊区中 $\frac{2\pi}{a}$ [111] 点, 则各个格点的谷间相干因子均为 1, 也就是对各个不同位置的等价格点的超精细作用是相同的, 由此得到上述二阶张量是各向同性的. 其结果如下:

$$\mathfrak{R}_n = \frac{1}{4} F''(\mathbf{r}_n) \begin{pmatrix} b_1 + 2b_3 + b_4 & 0 & 0 \\ 0 & b_1 + 2b_3 + b_4 & 0 \\ 0 & 0 & b_1 + 2b_3 + b_4 \end{pmatrix} \quad (7)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} b_1 &= \langle \phi^1 | H_R^{xx} | \phi^1 \rangle, \\ b_3 &= \langle \phi^1 | H_R^{xx} | \phi^2 \rangle, \\ b_4 &= \langle \phi^1 | H_R^{zz} | \phi^2 \rangle. \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

由上结果可看出,在无外界压力及内部应力作用下,束缚施主电子与杂质核及 Ge^{73} 核的超精细作用为各向同性. \mathfrak{R}_n 亦为各向同性.

在强场近似下,将等效自旋哈密顿量对角化,求出能量表达式.再利用自旋共振及核磁共振的选择定则,求出其共振频率的表示式分别为

$$h\nu_c = g\beta H + a_D M_D + \sum_n a_n M_n - \frac{1}{2} \sum_n \alpha R_n M_n, \quad (9)$$

$$h\nu_{\text{Ge}^{73}} = \left| -\left(\frac{\mu_{\text{Ge}^{73}}}{I_{\text{Ge}^{73}}}\right) H \pm \frac{1}{2} a_n \mp \frac{1}{2} \alpha R_n \right|; \quad (10)$$

其中

$$a_D = \frac{16\pi}{3} \beta \frac{\mu_D}{I_D} |\psi(0)|^2,$$

$$a_n = \frac{16\pi}{3} \beta \frac{\mu_{\text{Ge}^{73}}}{I_{\text{Ge}^{73}}} |\psi(\mathbf{r}_n)|^2,$$

M_D, M_n 分别为杂质核、 Ge^{73} 核的磁量子数; β 为电子的玻尔磁子. 由此,我们可以看出在无外压力及内应力的情况下,Ge 中浅施主电子的自旋共振线宽及电子与 Ge^{73} 核的超精细作用都是各向同性.

我们知道,由于 Ge 的导带底的位置至今没有严格方法判别^[7],若位于布里渊区 [111] 方向,偏离边界、距中点为 $|\mathbf{k}_0^j|$ 处,则共有八个等价导带底,见图 2. 有效质量基态波函数为

$$\begin{aligned} \psi'(\mathbf{r}) &= \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_j F^j(\mathbf{r}) \phi^j(\mathbf{r}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{8}} \sum_j F^j(\mathbf{r}) u_{\mathbf{k}_0^j} e^{i\mathbf{k}_0^j \cdot \mathbf{r}}, \end{aligned} \quad (11)$$

其中 $j = 1, 2, \dots, 8$. 以 $\psi'(\mathbf{r})$ 为基,求出等效自旋哈密顿量,其中超精细作用的二阶张量项为

$$\mathfrak{R}_n = \frac{1}{8} F''(\mathbf{r}_n) \begin{pmatrix} R'_1 & R'_4 & R'_5 \\ R'_4 & R'_2 & R'_6 \\ R'_5 & R'_6 & R'_3 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

其中

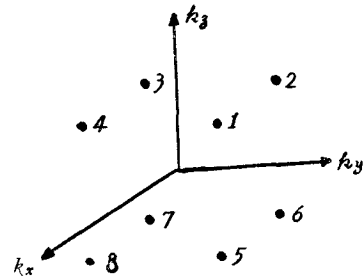


图 2 Ge 中八个等价导带底在第一布里渊区中的位置

$$\begin{aligned}
 R'_1 &= \{b'_1 + \cos 2k_0 z_n \operatorname{Re}(b'_2 \cos 2k_0 x_n \cos 2k_0 y_n) + \operatorname{Re}(b'_4 e^{i2k_0 z_n} + b'_5 e^{i2k_0 x_n} + \\
 &\quad + b'_4{}^* e^{i2k_0 y_n} + b'_8 e^{i2k_0 y_n} \cos 2k_0 x_n + b'_9 e^{i2k_0 z_n} \cos 2k_0 y_n + \\
 &\quad + b'_8{}^* e^{i2k_0 x_n} \cos 2k_0 z_n)\}, \\
 R'_2 &= \{b'_1 + \cos 2k_0 z_n \operatorname{Re}(b'_2 \cos 2k_0 x_n \cos 2k_0 y_n) + \operatorname{Re}(b'_4{}^* e^{i2k_0 z_n} + b'_4 e^{i2k_0 x_n} + \\
 &\quad + b'_5 e^{i2k_0 y_n} + b'_8{}^* e^{i2k_0 y_n} \cos 2k_0 x_n + b'_8 e^{i2k_0 z_n} \cos 2k_0 y_n + \\
 &\quad + b'_9 e^{i2k_0 x_n} \cos 2k_0 z_n)\}, \\
 R'_3 &= \{b'_1 + \cos 2k_0 z_n \operatorname{Re}(b'_2 \cos 2k_0 x_n \cos 2k_0 y_n) + \operatorname{Re}(b'_5 e^{i2k_0 z_n} + b'_4{}^* e^{i2k_0 x_n} + \\
 &\quad + b'_4 e^{i2k_0 y_n} + b'_9 e^{i2k_0 y_n} \cos 2k_0 x_n + b'_8{}^* e^{i2k_0 x_n} \cos 2k_0 z_n + \\
 &\quad + b'_8 e^{i2k_0 x_n} \cos 2k_0 z_n)\}, \\
 R'_4 &= \{\cos 2k_0 z_n \operatorname{Re}(-b'_3 \sin 2k_0 x_n \sin 2k_0 y_n) + \operatorname{Re}(i b'_6 e^{i2k_0 y_n} \sin 2k_0 x_n)\}, \\
 R'_5 &= \{\cos 2k_0 z_n \operatorname{Re}(i b'_3 \cos 2k_0 x_n \sin 2k_0 y_n) + \operatorname{Re}(i b'_7 e^{i2k_0 x_n} \sin 2k_0 z_n)\}, \\
 R'_6 &= \{\cos 2k_0 z_n \operatorname{Re}(i b'_3 \sin 2k_0 x_n \cos 2k_0 y_n) + \operatorname{Re}(i b'_5{}^* e^{i2k_0 z_n} \sin 2k_0 y_n)\};
 \end{aligned} \tag{13}$$

各个 b 参量的定义分别为

$$\left. \begin{aligned}
 b'_1 &= \langle \phi^1 | H_R^{xx} | \phi^1 \rangle, & b'_6 &= \langle \phi^1 | H_R^{xy} | \phi^3 \rangle, \\
 b'_2 &= \langle \phi^1 | H_R^{xx} | \phi^7 \rangle, & b'_7 &= \langle \phi^1 | H_R^{xz} | \phi^3 \rangle, \\
 b'_3 &= \langle \phi^1 | H_R^{xy} | \phi^7 \rangle, & b'_8 &= \langle \phi^1 | H_R^{xx} | \phi^3 \rangle, \\
 b'_4 &= \langle \phi^1 | H_R^{xx} | \phi^2 \rangle, & b'_9 &= \langle \phi^1 | H_R^{yz} | \phi^3 \rangle, \\
 b'_5 &= \langle \phi^1 | H_R^{zz} | \phi^2 \rangle, & &
 \end{aligned} \right\} \tag{14}$$

比较式(12)与式(7),可以看出,若导带底位于偏离 $\frac{2\pi}{a}$ [111] 点处,谷间相干效应引起不同等价点的 Ge^{73} 核与电子有不同的超精细作用,从而有明显的各向异性分裂. 在自旋共振中此部分贡献较小,在双共振中则相当明显. 所以通过电子与 Ge^{73} 核的双共振实验,有可能比较确切的判断 Ge 的导带底在第一布里渊区中的位置,而且可以进一步得到有关 Ge 的导带底 Bloch 函数的知识.

三、非均匀内应力效应

在实际晶体中,不可避免的存在非完整性,从而引起非均匀内应力效应. 在对 Ge 晶体中具体位错机构及其影响作探讨之前,首先利用畸变势理论推演在缓慢变化(缓变是指应力 $\{\tau_{ij}(\mathbf{r})\}$ 在杂质束缚电子波函数的范围内变化很小)的非均匀内应力作用下,各个谷能量的相对变化. 利用 Herring 畸变势理论,得到

$$\left. \begin{aligned}
 E_1 - E_{cg} &= \frac{1}{3} \mathcal{E}_u S_{44} [\tau_{12} + \tau_{13} + \tau_{23}], \\
 E_2 - E_{cg} &= \frac{1}{3} \mathcal{E}_u S_{44} [\tau_{12} - \tau_{13} - \tau_{23}], \\
 E_3 - E_{cg} &= \frac{1}{3} \mathcal{E}_u S_{44} [-\tau_{12} + \tau_{13} - \tau_{23}], \\
 E_4 - E_{cg} &= \frac{1}{3} \mathcal{E}_u S_{44} [-\tau_{12} - \tau_{13} + \tau_{23}],
 \end{aligned} \right\} \tag{15}$$

其中

$$E_{cg} = \frac{1}{3} (\mathcal{E}_d + \mathcal{E}_u) (S_{11} + 2S_{12}) (\tau_{11} + \tau_{22} + \tau_{33}),$$

\mathcal{E}_d 为张力畸变势, \mathcal{E}_u 为切应力畸变势. 由此引起谷轨道哈密顿量的对角项发生变化, 从而得到存在非均匀内应力情况下的谷轨道哈密顿量

$$-H'_{v_0} = \Delta_c \begin{vmatrix} x_1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & x_2 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & x_3 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & x_4 \end{vmatrix}, \quad (16)$$

其中 $x_i = (E_i - E_{cg})/\Delta_c$ 称为“谷应变”, 只有切应力部分引起“谷应变”. 由于非均匀内应力引起的谷应变相对谷轨道分裂引起的激发态和基态之间的能量差是很小的 ($\frac{x_i}{4} < 10^{-3} - 10^{-1}$), 因此可将内应力引起哈密顿量的变化作为微扰项处理. 利用变换“ T ”, 将谷轨道哈密顿量变到杂质基态和激发态的表象中得到

$$T^{-1}H'_{v_0}T = H_{v_0}^0 + H'_{v_0}, \quad (17)$$

这里

$$H_{v_0}^0 = \Delta_c \begin{pmatrix} -3 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix},$$

$$H'_{v_0} = \Delta_c \times \begin{pmatrix} -\frac{1}{4}(x_1+x_2+x_3+x_4) & -\frac{1}{4}(x_1+x_2-x_3-x_4) & -\frac{1}{2\sqrt{2}}(x_1-x_2) & -\frac{1}{2\sqrt{2}}(x_3-x_4) \\ -\frac{1}{4}(x_1+x_2-x_3-x_4) & -\frac{1}{4}(x_1+x_2+x_3+x_4) & -\frac{1}{2\sqrt{2}}(x_1-x_2) & \frac{1}{2\sqrt{2}}(x_3-x_4) \\ -\frac{1}{2\sqrt{2}}(x_1-x_2) & -\frac{1}{2\sqrt{2}}(x_1-x_2) & \frac{1}{2}(x_1+x_2) & 0 \\ -\frac{1}{2\sqrt{2}}(x_3-x_4) & \frac{1}{2\sqrt{2}}(x_3-x_4) & 0 & \frac{1}{2}(x_3+x_4) \end{pmatrix},$$

H'_{v_0} 为微扰项. 进一步利用缓变条件, 求出杂质波函数的变化

$$\psi'(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha_j^i F_j \phi_j, \quad (18)$$

其中

$$\alpha_1 = \frac{1}{2} - \frac{1}{32} (3x_1 - x_2 - x_3 - x_4),$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{2} - \frac{1}{32} (-x_1 + 3x_2 - x_3 - x_4),$$

$$\alpha_3 = \frac{1}{2} - \frac{1}{32} (-x_1 - x_2 + 3x_3 - x_4),$$

$$\alpha_4 = \frac{1}{2} - \frac{1}{32} (-x_1 - x_2 - x_3 + 3x_4).$$

利用变化后的杂质波函数(18),计算等效自旋哈密顿量中 g 因子及超精细作用的变化,得到

$$\delta \mathbb{G}^s = \mathbb{G}^s - \mathbb{G}^0 = \Delta g \begin{pmatrix} 0 & (\alpha_1^2 + \alpha_2^2 - \alpha_3^2 - \alpha_4^2) & (\alpha_1^2 - \alpha_2^2 + \alpha_3^2 - \alpha_4^2) \\ (\alpha_1^2 + \alpha_2^2 - \alpha_3^2 - \alpha_4^2) & 0 & (\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - \alpha_3^2 + \alpha_4^2) \\ (\alpha_1^2 - \alpha_2^2 + \alpha_3^2 - \alpha_4^2) & (\alpha_1^2 - \alpha_2^2 - \alpha_3^2 + \alpha_4^2) & 0 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

这里 $\Delta g = \frac{1}{3}(g_{\parallel} - g_{\perp})$. 在 Ge 中掺 As 时, $g_{\parallel} - g_{\perp} = -1.05$, $g_0 = 1.57$. 所以,只要有较小内应力作用,就可使 g 因子有较大变化.

$$\delta \phi = \frac{16}{3} \pi \beta \frac{\mu_{\text{Ge}^{73}}}{I_{\text{Ge}^{73}}} |u_i(0)|^2 \left[\left| \sum_j \alpha_j^i F_j(\mathbf{r}_n) \right|^2 - \frac{1}{4} \left| \sum_j F_j(\mathbf{r}_n) \right|^2 \right], \quad (20)$$

$$\delta R = \begin{pmatrix} R_1^i - \frac{1}{4} F^{\parallel}(b_1 + 2b_3 + b_4) & R_4^i & R_5^i \\ R_4^i & R_2^i - \frac{1}{4} F^{\parallel}(b_1 + 2b_3 + b_4) & R_6^i \\ R_5^i & R_6^i & R_3^i - \frac{1}{4} F^{\parallel}(b_1 + 2b_3 + b_4) \end{pmatrix}, \quad (21)$$

其中

$$\begin{aligned} R_1^i &= F^{\parallel}(\mathbf{r}_n)[(\alpha_{11} + \alpha_{22} + \alpha_{33} + \alpha_{44})b_1 + (\alpha_{12} + \alpha_{34} + \alpha_{13} + \alpha_{24})b_3 + (\alpha_{14} + \alpha_{23})b_4], \\ R_2^i &= F^{\parallel}(\mathbf{r}_n)[(\alpha_{11} + \alpha_{22} + \alpha_{33} + \alpha_{44})b_1 + (\alpha_{12} + \alpha_{34} + \alpha_{14} + \alpha_{23})b_3 + (\alpha_{13} + \alpha_{24})b_4], \\ R_3^i &= F^{\parallel}(\mathbf{r}_n)[(\alpha_{11} + \alpha_{22} + \alpha_{33} + \alpha_{44})b_1 + (\alpha_{14} + \alpha_{23} + \alpha_{13} + \alpha_{24})b_3 + (\alpha_{12} + \alpha_{34})b_4], \\ R_4^i &= F^{\parallel}(\mathbf{r}_n)[(\alpha_{11} + \alpha_{22} - \alpha_{33} - \alpha_{44})b_2 + (\alpha_{12} - \alpha_{34})b_5], \\ R_5^i &= F^{\parallel}(\mathbf{r}_n)[(\alpha_{11} - \alpha_{22} + \alpha_{33} - \alpha_{44})b_2 + (\alpha_{13} - \alpha_{42})b_5], \\ R_6^i &= F^{\parallel}(\mathbf{r}_n)[(\alpha_{11} - \alpha_{22} - \alpha_{33} + \alpha_{44})b_2 + (\alpha_{14} - \alpha_{23})b_5]; \end{aligned}$$

这里

$$\begin{aligned} b_2 &= \langle \phi^1 | H_R^{xy} | \phi^1 \rangle, \\ b_5 &= \langle \phi^1 | H_R^{xy} | \phi^2 \rangle. \end{aligned}$$

通过以上具体分析可以看出,当存在应变时, g 因子及超精细作用均发生各向异性变化;当应变是非均匀时,对于处在不同位置的杂质变化不一.由于杂质分布是无规的,因此贡献一非均匀线宽,通过对杂质位置的统计平均即可得到所引起的各向异性线宽.

总的线宽由三部分组成.第一部分是电子与 Ge^{73} 核的费米接触作用(此部分为各向同性,结果由 Kane 的二极矩计算给出^[41]);第二部分是应变引起 g 因子的各向异性贡献的非均匀加宽;第三部分是应变引起电子与杂质核和 Ge^{73} 核超精细作用变化贡献的非均匀加宽.所以近似地有¹⁾

1) 严格说来, $\overline{\Delta H}$ 在某些情况下不为零(如在刃型位错引起的应力场中),但非常小,可以忽略.

$$\Delta H_T^2 = \Delta H_1^2 + \Delta H_2^2 + \Delta H_3^2, \quad (22)$$

其中

$$\Delta H_1^2 = \left\{ \frac{32\pi}{3g} \frac{\mu_{Ge} g^2}{I_{Ge} g^3} \langle m_p^2 \rangle_{av}^{1/2} \frac{\eta}{4} \sum_n n_c |e^{i\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_c} F^j(\mathbf{r}_c)|^4 \right\}^2, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \Delta H_2^2 &= \left(\frac{\Delta g}{g_0} H \right)^2 \left(\frac{\mathcal{E}_a \mathcal{S}_{44}}{3E_{13}} \right)^2 \left\{ 4\overline{\tau_{12}^2} \sin^4 \theta + 4\sqrt{2} \overline{\tau_{12}(\tau_{13} + \tau_{23})} \times \right. \\ &\quad \left. \times \sin 2\theta \sin^2 \theta + 2(\overline{\tau_{13} + \tau_{23}})^2 \sin^2 2\theta \right\} = \\ &= N \{ a \sin^4 \theta + b \sin 2\theta \sin^2 \theta + c \sin^2 2\theta \}, \end{aligned} \quad (24)$$

$$\Delta H_3^2 = \left(\frac{\delta R_0}{R_0} + \sum_n \frac{\delta R_n}{R_n} \right)^2; \quad (25)$$

这里

$$\begin{aligned} \left(\frac{\delta R_0}{R_0} \right)^2 &= \left(\frac{2}{a_D} \right)^2 \left\{ \left[R_3^2 - \frac{1}{4} F''(b_1 + 2b_3 + b_4) \right] \cos^2 \theta + \right. \\ &\quad \left. + \left[\frac{1}{2} \left(R_1^2 - \frac{1}{4} F''(b_1 + 2b_2 + b_4) \right) + \frac{1}{2} \left(R_2^2 - \frac{1}{4} F''(b_1 + 2b_2 + b_4) \right) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + R_4^2 \right] \sin^2 \theta + \frac{1}{\sqrt{2}} [R_5^2 + R_6^2] \sin 2\theta \right\}^2, \end{aligned} \quad (26)$$

$\frac{\delta R_n}{R_n}$ 的形式与(26)类似, 此处从略。以上式中的平均是对杂质原子在非均匀应力场中的统计分布 $C(\mathbf{r})$ 函数进行的, 如

$$\left. \begin{aligned} \overline{\tau_{ij}\tau_{i'j'}} &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} \tau_{ij}\tau_{i'j'} C(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \\ \overline{(R_i^2)^2} &= \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega_0} (R_i^2)^2 C(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

在浅施主杂质情况, ΔH_3^2 项贡献相当于 ΔH_1^2 项的十分之一, 因此可略去。但在深能级杂质情况, 如 Ge 中掺 Ni^[8] 及 Si 中 A 心^[9] 自旋共振中, 必须考虑第三项。

四、Ge 中位错对浅施主电子自旋共振线宽的影响

在 Wilson^[4] 的实验中, 明显的给出随位错密度增加各向异性线宽加宽。Wilson 假设在一定位错密度下, 应变形成高斯分布, 在 [111] 方向平均分量为 ΔS , 推出当 \mathbf{H} 相对 [001] 轴偏转一个小角度时各向异性线宽的表达式, 因此不能圆满解释实验结果。

由于对实际晶体非均匀内应力的分析是非常复杂的问题。关于位错对 Ge 中自旋共振线宽的影响, 只能针对具体材料进行具体计算, 才有可能得到能和实验相比较的结果。此处由于对 Wilson 实验材料的具体位错情况并不了解, 所以不准各只针对实验结果进行解释, 而是打算从以拉伸法生长的 Ge 晶体中及在范性形变后可能存在的最主要的位错类型(由已有的位错实验分析^[10], 得知是沿 [211] 方向的纯刃型位错及沿 [110] 方向的纯螺型位错)出发, 进行计算和讨论。

1. 刃型位错 位错线沿 [211] 方向, 滑移矢量 \mathbf{b} 是 $\frac{1}{2}[110]$ 。从晶体对称性看, 这种位错共有 24 种等价情况。当 \mathbf{H} 主轴位于 [001] 方向且在 (110) 平面内旋转时, 只有四种

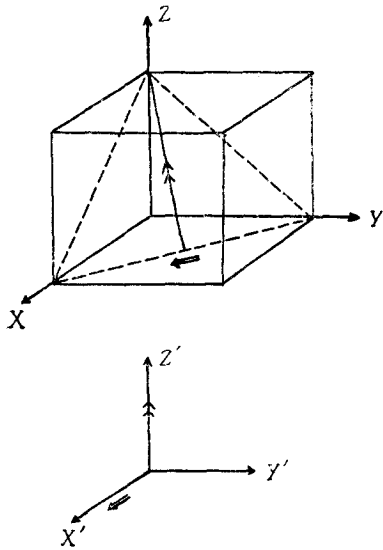


图3 X 为晶体固定坐标系, X' 为位错坐标系, \rightarrow 指位错方向, \Rightarrow 指滑移矢量方向

类型 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 、 $[\bar{1}12]$ 、 $[\bar{1}2\bar{1}]$ 与 $[\bar{1}21]$ 给出不同的各向异性线宽,其他均分别与此四种之一等价。

现以 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 为例进行计算。位错坐标系的选择如图3 X' ,在这个坐标系中刃型位错 $[\bar{1}\bar{1}2]$ 的应力分布为

$$\left. \begin{aligned} \tau_{xx} &= -D \frac{y'(3x'^2 + y'^2)}{(x'^2 + y'^2)}, \\ \tau_{yy} &= D \frac{y'(x'^2 - y'^2)}{(x'^2 + y'^2)}, \\ \tau_{zz} &= \nu(\tau_{xx} + \tau_{yy}), \\ \tau_{xy} &= D \frac{x'(x'^2 - y'^2)}{(x'^2 + y'^2)}; \end{aligned} \right\} \quad (28)$$

其中 $D = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)}$, G 为切应变模量, ν 为泊松比。

利用变换 S 将应力场变换到晶体的固定坐标系中,得到引起谷应变的切应力分量:

$$\left. \begin{aligned} \tau_{12} &= -\frac{1}{2}\tau_{xx} + \frac{1}{3}\tau_{yy} + \frac{1}{6}\tau_{zz}, \\ \tau_{13} &= \frac{1}{\sqrt{6}}\tau_{xy} + \frac{1}{3}\tau_{yy} - \frac{1}{3}\tau_{zz}, \\ \tau_{23} &= -\frac{1}{\sqrt{6}}\tau_{xy} + \frac{1}{3}\tau_{yy} - \frac{1}{3}\tau_{zz}. \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

刃型位错与杂质的相互作用势能

$$V = A \frac{\sin \theta}{r}. \quad (30)$$

当考虑杂质原子弹性球和球外应力场的相互作用能,以及在应力场作用下球本身的形变能,得到

$$A = 4Gbsr^3, \quad (31)$$

这里 $sr = r' - r$, r 为原子晶体中原子半径, r' 为杂质原子半径。由于稳定态的要求,对于掺 P, As 原子,其共价半径比 Ge 小^[11],因此主要分布在位错上半受压部分。对于掺 Sb 原子情况,其共价半径比 Ge 大^[11],所以主要分布在位错下半受张部分。在距位错中心较远处,当位错应力场强度在比杂质原子大得多的范围内基本不变的情况下,杂质服从麦克斯威-玻尔兹曼分布。对于距位错中心 (r, θ) 处杂质浓度的分布为

$$C(r, \theta) = C_0 \exp[-V(r, \theta)/kT]. \quad (32)$$

将式(29), (32)代入式(24),计算三个应力场的统计平均值。积分时将位错附近处挖掉

(其半径 r_0 取 $2A$), 积分上限与位错密度的关系为 $r_1 = \frac{1}{\sqrt{\pi d}}$, 则

$$\left. \begin{aligned}
 a &= \frac{4}{\Omega} \int_{r_0}^{r_1} \int_0^{2\pi} \left[-\frac{1}{2} \tau_{xx} + \frac{1}{3} \tau_{yy} + \frac{1}{6} \tau_{zz} \right]^2 C_0 e^{-\frac{V(r,\theta)}{kT}} r dr d\theta, \\
 b &= \frac{4\sqrt{2}}{\Omega} \int_{r_0}^{r_1} \int_0^{2\pi} \left[-\frac{1}{2} \tau_{xx} + \frac{1}{3} \tau_{yy} + \frac{1}{6} \tau_{zz} \right] \times \\
 &\quad \times \left[\frac{2}{3} \tau_{yy} - \frac{2}{3} \tau_{zz} \right] C_0 e^{-\frac{V(r,\theta)}{kT}} r dr d\theta, \\
 c &= \frac{2}{\Omega} \int_{r_0}^{r_1} \int_0^{2\pi} \left[\frac{2}{3} \tau_{yy} - \frac{2}{3} \tau_{zz} \right]^2 C_0 e^{-\frac{V(r,\theta)}{kT}} r dr d\theta.
 \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

下面给出其中一项的具体计算,如

$$\overline{\tau_{xx}^2} = \frac{1}{\Omega} \int_{r_0}^{r_1} \int_0^{2\pi} \tau_{xx}^2 C_0 e^{-\frac{A' \sin \theta}{r}} r dr d\theta, \quad (34)$$

这里 $A' = A/kT = 4Gb\epsilon r^3/kT$. 对于指数因子项, 利用 Bessel 函数展开, 设 $x = \frac{1}{r}$, 则

$$\begin{aligned}
 e^{-A' \sin \theta / r} &= e^{-A' x \sin \theta} = e^{i x \sin \theta} = \\
 &= J_0(z) + 2 \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(z) \cos 2n\theta + 2i \sum_{n=1}^{\infty} J_{2n-1}(z) \sin (2n-1)\theta,
 \end{aligned} \quad (35)$$

其中取 $z = iA'x$. 将式(28), (35)代入式(34)中, 完成对角度部分积分后, 得到

$$\overline{\tau_{xx}^2} = \frac{D^2 C_0 \pi}{4\Omega} \int_{z_0}^{z_1} \left[\frac{J_0(z)}{z} + \frac{6J_4(z)}{z} + \frac{3J_2(z)}{z} - \frac{10J_0(z)}{z} \right] dz. \quad (36)$$

利用虚宗量 Bessel 函数的性质, 可以得到四个 Bessel 函数的积分结果:

$$\left. \begin{aligned}
 \int \frac{J_0(z)}{z} dz &= \int \frac{dz}{z} - 2 \int \frac{J_2(z)}{z} dz - 2 \int \frac{J_4(z)}{z} dz - 2 \int \frac{J_6(z)}{z} dz - \dots, \\
 \int \frac{J_2(z)}{z} dz &= -\frac{J_1(z)}{z}, \\
 \int \frac{J_4(z)}{z} dz &= -\frac{1}{4} (J_0 + 2J_2 + J_4), \\
 \int \frac{J_6(z)}{z} dz &= -\frac{1}{6} (J_0 + 2J_2 + 2J_4 + J_6).
 \end{aligned} \right\} \quad (37)$$

考虑到虚宗量 Bessel 函数与实宗量 Bessel 函数之间的关系式

$$J_\nu(ix) = e^{i\frac{\pi}{2}\nu} I_\nu(x), \quad (38)$$

再利用实宗量 Bessel 函数表, 可以得到积分结果, 其中 C_0 由归一化条件决定. 同样可以求出其他应力场的统计平均值, 取参量为: $G = 0.687 \times 10^{12} \text{ dyn/cm}^2$, $\nu = 0.1557$, $\epsilon r = (1.18 - 1.22) \times 10^{-8} \text{ cm}$, $T = 900^\circ \text{ K}$, $E_{13}/\bar{E}_u = 2.20 \times 10^{-4}$, $H = 4000 \text{ Gauss}$. 通过具体计算, 可将式(33) a, b, c 三个参量求出, 结果见表 1. 通过式(24)可得线宽随 \mathbf{H} 方向变化的关系式, 结果见图 4. 同样可得沿其他三个独立方向位错线应力场下的各向异性线宽, 结果见表 1 与图 5, 6, 7.

2. 螺型位错 位错线沿 $[110]$ 方向, 滑移矢量 \mathbf{b} 是 $\frac{1}{2}[110]$. 对于此种类型的位错,

表 1

	d [e cm^{-2}](位错密度)	a	b	c
	[$\bar{1}\bar{1}2$]	10^2	2.1817	0.1723
2×10^4		3.6236×10^2	0.2680×10^2	0.5868×10^2
2×10^5		3.3019×10^3	0.2346×10^3	0.5375×10^3
5×10^6		10.1860×10^4	0.4697×10^4	1.1717×10^4
[$\bar{1}12$]	10^2	2.1817	0	0.8482
	2×10^4	3.6236×10^2	0	1.3988×10^2
	2×10^5	3.3019×10^3	0	1.2691×10^3
	5×10^6	10.1867×10^4	0	2.7214×10^4
[$\bar{1}2\bar{1}$]	10^2	0.9972	-0.2661	1.4512
	2×10^4	0.9928×10^2	-0.4402×10^2	2.4029×10^2
	2×10^5	0.9034×10^3	-0.4008×10^3	2.1856×10^3
	5×10^6	1.9466×10^4	-0.8611×10^4	4.7048×10^4
[$\bar{1}21$]	10^2	0.9972	0.4385	1.3301
	2×10^4	0.9928×10^2	0.7082×10^2	2.2134×10^2
	2×10^5	0.9034×10^3	0.6348×10^3	2.0198×10^3
	5×10^6	1.9466×10^4	1.3308×10^4	4.3725×10^4

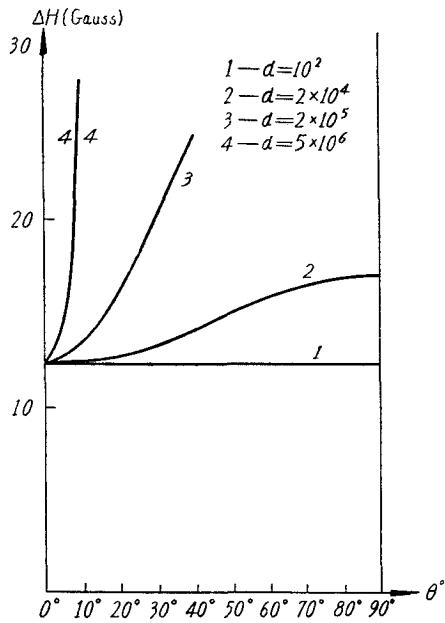


图 4 \mathbf{H} 在(110)面内旋转时,在[$\bar{1}\bar{1}2$]刃型位错作用下, Ge 中掺 As, 电子自旋共振线宽随 \mathbf{H} 方向的变化

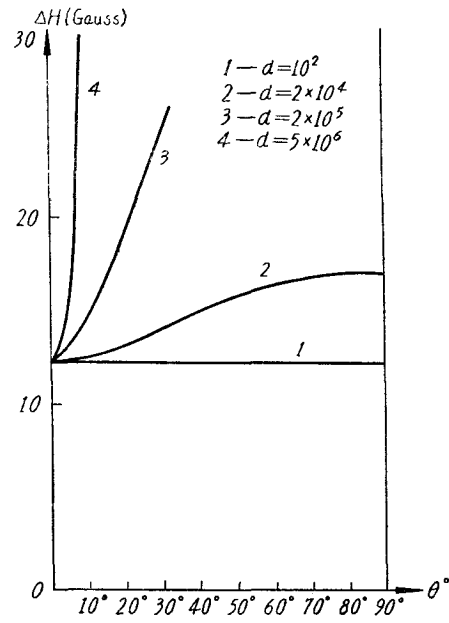


图 5 \mathbf{H} 在(110)面内旋转时,在[$\bar{1}12$]刃型位错作用下, Ge 中掺 As, 电子自旋共振线宽随 \mathbf{H} 方向的变化

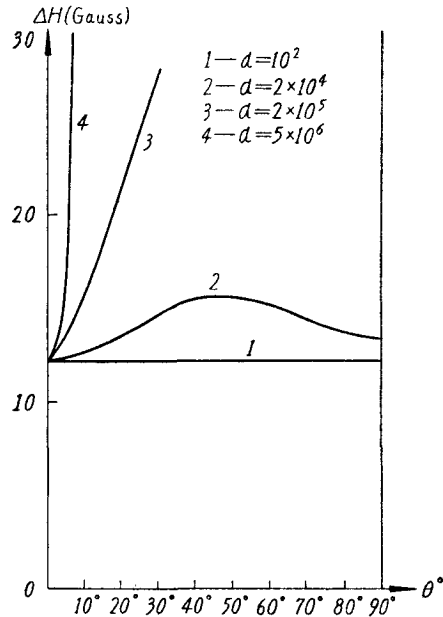


图 6 H 在(110)面内旋转,在 $[\bar{1}2\bar{1}]$ 刃型位错作用下, Ge 中掺 As, 电子自旋共振线宽随 H 方向的变化

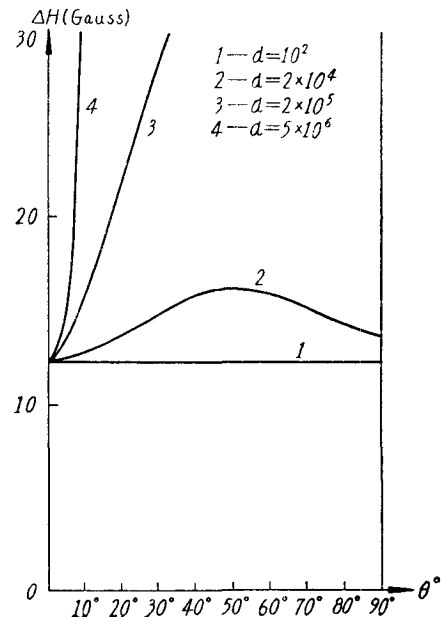


图 7 H 在(110)面内旋转,在 $[\bar{1}21]$ 刃型位错作用下, Ge 中掺 As, 电子自旋共振线宽随 H 方向的变化

从晶体对称性看存在 12 种等价情况。当磁场主轴位于 $[001]$ 方向且在(110)平面内旋转时,只有三种类型给出不同的各向异性线宽;即 $[\bar{1}\bar{1}0]$, $[\bar{1}\bar{1}0]$ 和 $[\bar{1}0\bar{1}]$ 。其他类型均分别与此三种之一等价。

对于 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 位错坐标系的选择如图 8,在此坐标系中螺型位错的应力场分布为

$$\left. \begin{aligned} \tau'_{xz} &= -\frac{Gb}{2\pi} \frac{y''}{(x''^2 + y''^2)}, \\ \tau'_{yz} &= \frac{Gb}{2\pi} \frac{x''}{(x''^2 + y''^2)}. \end{aligned} \right\} \quad (39)$$

利用 S' 变换将其变到晶体的固定坐标系中,则引起“谷应变”的切应变分量分别为

$$\left. \begin{aligned} \tau'_{12} &= 0, \\ \tau'_{13} + \tau'_{23} &= -\sqrt{\frac{2}{3}} \tau'_{xz} - \frac{2}{\sqrt{3}} \tau'_{yz}. \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

由于螺型位错应力场为切应力,所以没有和杂质原子的相互作用势,因而杂质在位错应力场中分布是均匀的。在此情况下,计算螺型位错应力场引起的各向异性线宽

$$\begin{aligned} \Delta H_2^2 &= \left(\frac{\Delta g H}{g_0} \right)^2 \left(\frac{E_u S_{44}}{3E_{13}} \right)^2 d \frac{(Gb)^2}{2\pi} \times \\ &\times [\log r_1 - \log r_0] 2 \sin^2 2\theta = NM 2 \sin^2 2\theta, \end{aligned} \quad (41)$$

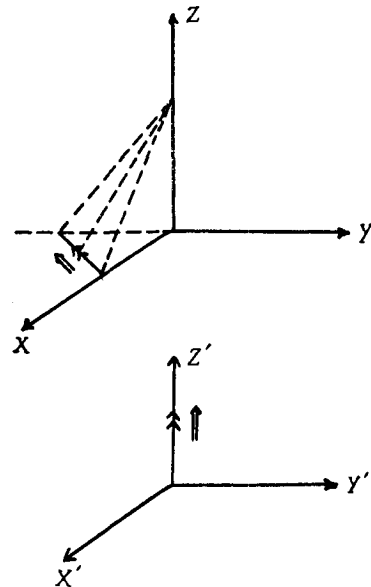


图 8 X 为晶体固定坐标系, X' 为位错坐标系, \rightarrow 指位错方向, \Rightarrow 指滑移矢量方向

具体结果见表 2 和图 9.

表 2

$d[\text{e cm}^{-2}]$	10^2	2×10^4	2×10^5	5×10^6
M	1.7851	2.9334×10^2	2.6566×10^3	5.6745×10^4

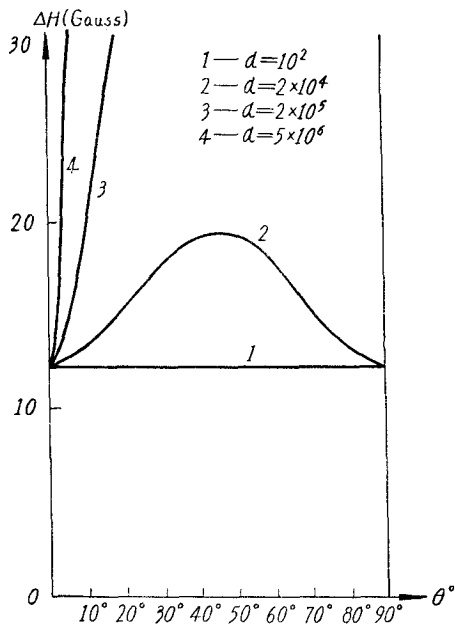


图 9 \mathbf{H} 在(110)面内旋转,在 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 螺型位错作用下,Ge 中掺 As,电子自旋共振线宽随 \mathbf{H} 方向的变化

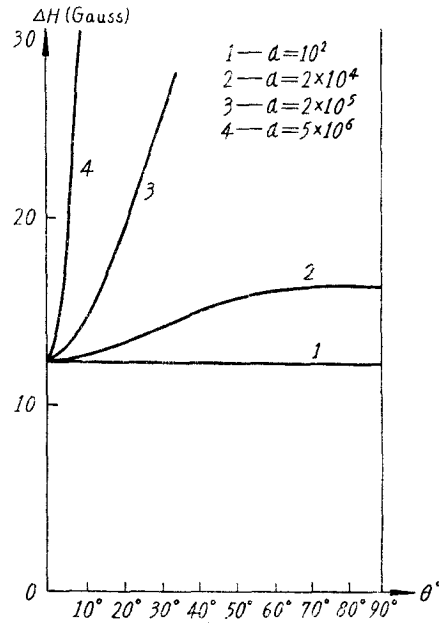


图 10 \mathbf{H} 在(110)面内旋转,在 $[\bar{1}0\bar{1}]$ 螺型位错作用下,Ge 中掺 As,电子自旋共振线宽随 \mathbf{H} 方向的变化

对于 $[\bar{1}0\bar{1}]$ 进行同样计算,得到

$$\Delta H_2^2 = NM \left[\sin^4 \theta + \frac{1}{2} \sin^2 2\theta \right], \quad (42)$$

具体结果见图 10.

对于 $[\bar{1}\bar{1}0]$ 的情况, ΔH_2^2 等于零,即此种取向的螺型位错不引起各向异性线宽.

由计算结果可以看出,以下几点结论是比较突出而且和一般考虑不完全一致的:

(1) 不同类型的位错由于应力场的分布不同,对线宽的影响很不一样.

(2) 螺型位错与杂质没有相互作用势能,因此并不影响杂质原子的分布;刃型位错与杂质有相互作用势,使杂质分布改变,但由于杂质分布改变对线宽的影响并不大,此部分修正相当于均匀分布引起线宽的 1/10 或略大一些. 在粗略估计时是完全可以近似看成是均匀分布的,因此 Wilson 实验中用中子辐照的样品线宽比一般情况下小很多,就不能只用杂质分布的不同来加以说明. 这点将在下面谈到. 此外,线宽值主要由靠近位错的杂质原子贡献的,其值近似地有 $\Delta H_2^2 \sim d$.

(3) 同一类型位错,从晶体的对称性看来,可以有几种等价取向,但在一般情况下,往

往只存在一种。在计算中我们看到不同取向的同一类型位错对线宽的贡献不只在数值上不一致,而且在各向异性行为上也有所不同。刃型位错由于 $\sin^2 2\theta$ 前面系数不同,在 $\theta \sim \frac{\pi}{2}$ 处有些位错方向的线宽上升,有些则下降;对螺型位错亦然,甚至有一种是根本不引起各向异性线宽的(即 $[1\bar{1}0]$ 螺型位错)。换言之,对同一样品,磁场在 (110) 面内转动线宽的变化是不同的,因而进一步结合对晶体中位错类型及取向分析测量自旋共振线宽是有意义的。

(4) 和 Wilson 实验作粗略比较,可以看出,在位错密度较小时,一般由位错引起应力计算出的线宽比实际要小,看来可能是在样品引入形变过程中产生的非均匀应力起主要作用,这点还可以说明下面两事实,即如果主要是位错的应力起作用则 $\Delta H_2^2 \sim d$,但实际上, ΔH_2^2 随 d 的上升是比较慢的。此外,由于杂质分布状况影响很小,用中子照射样品的各向异性线宽很小,也可能是由于内应力很小的缘故,如果认为应力分布完全无规:

$$\overline{\tau_{12}^2} = \overline{\tau_{23}^2} = \overline{\tau_{13}^2},$$

则

$$\Delta H_2^2 \sim \sin^4 \theta + \sin^2 2\theta,$$

这在 $\theta \sim \frac{\pi}{2}$ 处下降很小,和实验大致符合。

但是当位错密度很大时 ($d \geq 10^5$), 位错应力场的作用是主要的,某些位错方向计算的结果比实验值还要大(在 Wilson 的实验中,样品的类型及位错取向均未给出,因此不能完全肯定)。

五、討 論

(1) 由于采用微扰论(在已报导的实验条件范围内是可用的),我们可以彻底地计算出各种内应力及位错对共振线宽的影响,计算结果和一般直观的讨论不完全一致,这些结论还有待于实验进一步的证实。

(2) 对于位错应力场我们采用了各向同性的弹性模型,并且不考虑非常靠近位错中心的情况,看来,这个近似对结果并没有什么影响,因为由计算可看出,中心的影响主要反映在 $\log r_0$ 内,因而 r_0 变化所起的效果是很小的。

(3) 对用双共振测量核磁共振频率的超精细移动能使我们准确判断 Ge 中导带底的位置,同时也可能对杂质波函数的分布有进一步的了解。

本文是在黄昆教授的指导和鼓励下进行的,并与甘子钊、霍裕平、杨顺华、马本堃等同志进行过有益的讨论,作者在此一并致以深切的谢意。

参 考 文 献

- [1] Feher, G., *Phys. Rev.*, **114** (1959), 1219.
- [2] Wilson, D. K., Feher, G., *Phys. Rev.*, **124** (1961), 1068.
- [3] Ludwig, G. W., Woodbury, H. H., *Solid State Physics*, **13** (1962), 223.
- [4] Wilson, D. K., *Phys. Rev.*, **134** (1964), A265.
- [5] 甘子钊, 物理学报, **21** (1965), 691.
- [6] 张绮香, 物理学报, **21** (1965), 1139.
- [7] Feher, G., *Proceedings International Conference on Semiconductor Physics Prague*. (1960), 579.

- [8] Ludwig, G. W., Woidbury, H. H., *Phys. Rev.*, **113** (1959), 1014.
[9] Bemski, G., *J. Appl. Phys.*, **30** (1959), 1195.
[10] Bardsley, W., Bell, R. L. and Stranghan, B. W., *J. Electron. Cont.*, **5** (1958), 19.
[11] Pauling, L., *The Nature of the Chemical Bond*. (1960).

THE SPIN-RESONANCE OF DONOR ELECTRON IN Ge AND ANISOTROPIC LINE WIDTH

CHANG YI-HSIANG

ABSTRACT

In this paper the effective mass wave function of the bound shallow donor electron in Ge was used to obtain the spin-Hamiltonian. It was shown that the resonance frequency is anisotropic only if the minima of the conduction band deviate from the symmetry points $\frac{2\pi}{a}[111]$, provided there is no stress. This makes it possible to determine whether the minima of the conduction band slightly deviate from the $\frac{2\pi}{a}[111]$ points or not by means of experiments of double resonance.

The general expressions of the resonance frequency and anisotropic line width were obtained by taking the smoothly varying nonhomogeneous stress as perturbation. Furthermore, we calculated in detail the nonhomogeneous broadening of the resonance line under the action of the stress of dislocations in Ge generated during the growth of single crystals by the pulling method or by means of plastic deformation (edge dislocation of the [211] direction and screw dislocation of [110]). It was pointed out that the anisotropy of line width is essentially different for different types of dislocations, and also for different equivalent directions. In comparison with the experimental results of Wilson^[4], we concluded that, as the density of dislocation is smaller than 10^4 cm^{-2} , the dislocation stress is not the main cause of broadening, so that the line width should have similar anisotropy as the magnetic field is oriented in different (110) planes. When the density is larger than 10^5 cm^{-2} , dislocation stress gives the main contribution to broadening. This effect can be easily examined experimentally.