

硅中空穴与核的超精细作用及 p 型 硅的核磁弛豫*

甘 子 釗

(北京大学物理系)

提 要

本文把半导体中载流子和它的原子核的超精细作用(包括非接触项)表达为作用在有效质量波函数上的“准接触作用”。具体对硅中 Si^{29} 核和价带空穴的这个作用可表达为

$$\{S_1(J_x\mu_{nx} + J_y\mu_{ny} + J_z\mu_{nz}) + S_2(J_x^2\mu_{nx} + J_y^2\mu_{ny} + J_z^2\mu_{nz})\}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n),$$

参量 S_1 、 S_2 是联系着价带顶的波函数的一些积分;一般地 $S_2 \approx 0$ 。用它来处理了 p 型硅中 Si^{29} 核的核自旋弛豫,得到弛豫时间的表达式;从弛豫时间的实验值估计了 S_1 的值;还从价带自旋轨道分裂值估计了同一参量。

我們知道,对没有电四极矩的核 ($I \leq 1/2$ 的核),电子和核的超精细作用可以表达为^[1]

$$H_h = \frac{8\pi}{3} \frac{e\hbar}{mc} \left(\frac{\hat{\sigma}}{2} \cdot \mu_n \right) \delta(\mathbf{r}) - \frac{e\hbar}{mc} \frac{1}{r^3} \left(\frac{1}{2} \hat{\sigma} \cdot \mu_n - \frac{3}{2} \frac{(\hat{\sigma} \cdot \mathbf{r})(\mu_n \cdot \mathbf{r})}{r^2} - \frac{\mathbf{J}}{\hbar} \cdot \mu_n \right), \quad (1)$$

其中 μ_n 是核磁矩算符, $\hat{\sigma}$ 是泡利算符, $\mathbf{J}$ 是电子的轨道角动量算符, m 、 e 是电子的质量与电荷。为了方便,这里假定核所在的位置是原点。(1)中第一项是相对论效应,称费米接触项;第二项表示了核磁矩和电子自旋磁矩的偶极相互作用以及核磁矩与电子轨道运动的耦合。

在金属中载流子和核的超精细作用表现在金属的核磁共振弛豫和奈特位移上。理论上通常只具体地考虑这些作用中的费米接触项;但其它项的作用也已经发现,表现为各向异性的奈特位移所引起的共振线非对称变宽,对核磁弛豫过程亦有一定贡献^[2,3]。半导体的载流子与核的超精细作用表现在浅能级杂质的束缚电子的电子自旋共振线的超精细结构上以及核共振弛豫上,在柯恩 (W. Kohn) 等^[4]关于前者的理论以及布伦别格 (N. Bloembergen) 等^[5]关于后者的理论中都只考虑了费米接触作用。费希尔 (G. Feher) 等^[6]已看到了硅中施主束缚电子和 Si^{29} 核的各向异性超精细作用,它只能是非接触项的贡献。舒尔曼 (R. G. Shulman) 等^[7]观察了 p 型硅中核自旋弛豫,证明它是由于载流子-空穴与核的超精细作用。但价带顶波函数在核上的值是等于零的,所以这超精细作用主要是反

* 1964 年 8 月 27 日收到。

映了非接触作用的贡献。鲁得维格 (G. W. Ludwig) 等^[8]还观察到硅中受主 In, Zn 的电子自旋共振的超精细结构。本文是从理论上讨论布洛赫电子和核的超精细作用, 将先导出一个一般的理论形式, 然后把它在硅的价带的情况下具体化, 并根据价带的自旋轨道耦合分裂值, 估计了相应的参量。用这种形式来处理了 *p* 型 Si 的核自旋弛豫, 亦从实验值来估计了有关参量值。张綺香同志已在另一文^[28]中分析了导带电子和核的超精细作用, 并对费希尔的实验作了细致的讨论。

一、 H_h 在以布洛赫函数为基的表象上的一般表达

半导体中载流子的运动状态以布洛赫函数为基来描述是特别有效的, 它引导到通常的有效质量近似^[4,9], 在这近似下, 载流子状态表达为

$$\psi_i = \sum_{\mathbf{k}} f_{0i,\mathbf{k}} \psi_{0i,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2)$$

其中 $\psi_{0i,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{0i,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 是电子的布洛赫函数, $0i$ 是带的标号, 在有效质量近似下, 只求遍载流子所属的简并带的标号, $\mathbf{k}$ 是布洛赫波的波矢, $f_{0i,\mathbf{k}}$ 有显著值的范围是在带底 (或顶) 附近的一个远小于布里渊区的范围中。如果引入有效质量波函数

$$f_{0i}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} f_{0i,\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (3)$$

它满足有效质量运动方程。由于载流子和核的超精细作用 H_h 总是可以当作很小的微扰处理, 最方便的是把 H_h 在同样的表象上处理, 把它表达在有效质量波函数上。把 H_h 重写为

$$\left. \begin{aligned} H_h &= H_{h_1} + H_{h_2} + H_{h_3}, \\ H_{h_1} &= \frac{8\pi}{3} \frac{e\hbar}{mc} \left(\frac{\hat{\sigma}}{2} \cdot \mu_n \right) \delta(\mathbf{r}), \\ H_{h_2} &= -\frac{e\hbar}{mc} \frac{1}{r^3} \left(\frac{\hat{\sigma}}{2} \cdot \mu_n - \frac{3}{2} \left(\frac{1}{r^2} \right) (\hat{\sigma} \cdot \mathbf{r})(\mu_n \cdot \mathbf{r}) \right), \\ H_{h_3} &= \frac{e}{mc} \frac{\mathbf{J}}{r^3} \cdot \mu_n. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

设有二个如同 (2) 式所示的载流子状态: ψ_i 与 ψ_j , 求 H_h 在它们之间的矩阵元; 对 H_{h_1} , 得

$$\langle \psi_i | H_{h_1} | \psi_j \rangle = \sum_{i,j} f_{0i,\mathbf{k}}^* f_{0j,\mathbf{k}'} \frac{8\pi}{3} \frac{e\hbar}{mc} \langle u_{0i,\mathbf{k}}(0) | \frac{1}{2} \hat{\sigma} | u_{0j,\mathbf{k}'}(0) \rangle \mu_n, \quad (5)$$

其中 $\langle u_{0i,\mathbf{k}}(0) | \frac{1}{2} \hat{\sigma} | u_{0j,\mathbf{k}'}(0) \rangle$ 是在自旋空间上的求积。象文献 [9] 中证明的, 在一级近似下可以略去 $u_{0i,\mathbf{k}}$, $u_{0j,\mathbf{k}'}$ 与 $\mathbf{k}$, $\mathbf{k}'$ 的关系¹⁾,

$$\left\langle u_{0i,\mathbf{k}}(0) \left| \frac{1}{2} \hat{\sigma} \right| u_{0j,\mathbf{k}'}(0) \right\rangle \approx \left\langle u_{0i,0}(0) \left| \frac{1}{2} \hat{\sigma} \right| u_{0j,0}(0) \right\rangle \equiv s_{ij}, \quad (6)$$

于是

1) 为简单起见, 这里认为带底(顶)是在 $\mathbf{k} = 0$ 处的, 如不是这样, 则把这里的 $\mathbf{k} = 0$ 都理解作 $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ (带底或带顶所在), $\mathbf{k}$ 理解作 $\mathbf{k} - \mathbf{k}_0$ 即可。

$$\langle \psi_f | H_{h_1} | \psi_\varphi \rangle = \sum_{i,j} f_{0i}^*(0) f_{0j}(0) \mathbf{s}_{ij} \cdot \boldsymbol{\mu}_n, \quad (7)$$

由此可見, H_{h_1} 在有效质量波函数上的表达可以表达为在有效质量运动方程中的微扰项:

$$\frac{8\pi}{3} \frac{e\hbar}{mc} \mathbf{s} \cdot \boldsymbol{\mu}_n \delta(\mathbf{r} - 0), \quad (8)$$

$\mathbf{s}$ 的分量是 (6) 式所定义的矩阵, (8) 式中的 δ 函数是只作用到有效质量波函数上的. 文献 [10] 中讨论 Ge, Si 导带电子的 g 因子时曾证明过对 Ge, Si 导带来说 $\mathbf{s}$ 的形式就是泡利矩阵, 即 $\mathbf{s} \approx |u_0(0)|^2 \frac{1}{2} \hat{\sigma}$. 所以, 对 Ge, Si 导带电子来说, 费米接触作用应表达为

$$\frac{8\pi}{3} \frac{e\hbar}{mc} \frac{1}{2} \hat{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \quad \mathbf{r}_n \text{ 是核所在位置. 柯恩}^{[4]} \text{ 曾经把它表达为 } \frac{8\pi}{3} \frac{e\hbar}{mc} \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbf{g}}, \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mu}_n \right) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \text{ 即把电子的磁矩改为有效磁矩, 这看来是不恰当的.}$$

现在讨论 H_{h_2} , 按照文献 [11] 用傅里叶积分表示¹⁾

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{r^3} (\boldsymbol{\mu}_c \cdot \boldsymbol{\mu}_n) - \frac{3}{r^5} (\boldsymbol{\mu}_c \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{r}) \right]' &= \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}}{q^2} \left[(\boldsymbol{\mu}_c \cdot \mathbf{q})(\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{q}) - \frac{1}{3} q^2 (\boldsymbol{\mu}_c \cdot \boldsymbol{\mu}_n) \right] d\mathbf{q}, \end{aligned} \quad (9)$$

其中 $\boldsymbol{\mu}_c = \frac{e\hbar}{2mc} \boldsymbol{\sigma}$, 对 H_{h_2} 求 ψ_f, ψ_φ 之间的矩阵元:

$$\begin{aligned} \langle \psi_f | H_{h_2} | \psi_\varphi \rangle &= \sum_{ij} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} f_{0i}^* \mathbf{k} \varphi_{0j, \mathbf{k}'} \frac{1}{2\pi^2} \int d\mathbf{q} \frac{1}{q^2} \int d\mathbf{r} \{ [\langle u_{ik}^*(\mathbf{r}) | \boldsymbol{\mu}_c | u_{jk'}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \mathbf{q}] \times \\ &\times [\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{q}] - \frac{1}{3} q^2 [\langle u_{ik}^*(\mathbf{r}) | \boldsymbol{\mu}_c | u_{jk'}(\mathbf{r}) \rangle \cdot \boldsymbol{\mu}_n] e^{i(\mathbf{k}' + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} \}, \end{aligned} \quad (10)$$

由于 u_{ik} 的周期性, 很易看出

$$\int \langle u_{ik}^*(\mathbf{r}) | \boldsymbol{\mu}_c | u_{jk'}(\mathbf{r}) \rangle e^{i(\mathbf{k}' + \mathbf{q} - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}} d\mathbf{r} = \sum_n A_{ij, n}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k} + \mathbf{q} - \mathbf{K}_n), \quad (11)$$

其中 $\mathbf{K}_n$ 是倒格矢. 对 (11) 式中 $\mathbf{K}_n = 0$ 的项,

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \int \frac{d\mathbf{q}}{2\pi^2} f_{0i}^* \mathbf{k} \varphi_{0j, \mathbf{k}'} \frac{1}{q^2} [(\boldsymbol{\mu}_c)_{ij, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \cdot \mathbf{q})(\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{q}) - \\ - \frac{1}{3} q^2 (\boldsymbol{\mu}_c)_{ij, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \cdot \boldsymbol{\mu}_n] \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{q}), \end{aligned} \quad (12)$$

其中

$$(\boldsymbol{\mu}_c)_{ij, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} = \int \langle u_{ik}^*(\mathbf{r}) | \boldsymbol{\mu}_c | u_{jk'}(\mathbf{r}) \rangle d\mathbf{r},$$

和以前一样略去它与 $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ 的关系,

$$(\boldsymbol{\mu}_c)_{ij, \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \approx (\boldsymbol{\mu}_c)_{ij, 00} \equiv (\boldsymbol{\mu}_c)_{ij}. \quad (13)$$

代入 (12) 式得到近似式为

$$\begin{aligned} \sum_{\mathbf{k}} \sum_{ij} \int \frac{1}{2\pi^2} d\mathbf{q} f_{0i}^* \mathbf{k} \varphi_{0j, \mathbf{k} - \mathbf{q}} \left[\frac{1}{q^2} ((\boldsymbol{\mu}_c)_{ij} \cdot \mathbf{q})(\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{q}) - \frac{1}{3} q^2 ((\boldsymbol{\mu}_c)_{ij} \cdot \boldsymbol{\mu}_n) \right] = \\ = \sum_{ij} \int d\mathbf{r} f_{0i}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{r^3} ((\boldsymbol{\mu}_c)_{ij} \cdot \boldsymbol{\mu}_n) - \frac{3}{r^5} ((\boldsymbol{\mu}_c)_{ij} \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{r}) \right] \varphi_{0j}(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (14)$$

1) 在 (9) 式中 $[\]'$ 的含义是在求积中除去原点附近的一个半径趋于零的球, 可参看文献 [1, 11].

它相当于完全略去布洛赫函数在元胞内的变化,在有效质量方程的哈密顿量中形式地引入某一个偶极相互作用.

对(11)中 $\mathbf{K}_n \approx 0$ 的项,可以得到

$$\sum_{ij} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} f_{0i\mathbf{k}}^* \varphi_{0j\mathbf{k}'} \left\{ \frac{1}{2\pi^2} \sum_{n \neq 0} e^{i(\mathbf{K}_n + \mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} \left(\frac{1}{|\mathbf{K}_n + \mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2} \right) \times \right. \\ \times [(\mathbf{A}_{ijn}(\mathbf{k}\mathbf{k}') \cdot (\mathbf{K}_n + \mathbf{k} - \mathbf{k}'))(\boldsymbol{\mu}_n \cdot (\mathbf{K}_n + \mathbf{k} - \mathbf{k}')) - \\ \left. - \frac{1}{3} |\mathbf{K}_n + \mathbf{k} - \mathbf{k}'|^2 (\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{A}_{ijn}(\mathbf{k}\mathbf{k}'))] \right\}. \quad (15)$$

由于 $\mathbf{K}_n$ 比 $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ 大得多,如果略去(15)和 $\mathbf{k}\mathbf{k}'$ 的关系,即相当于把 $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ 等于零代入该式中,把这样得到的括号中的项记作 G_{ij} , 则(15)成为

$$\sum_{ij} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} f_{0i\mathbf{k}}^* \varphi_{0j\mathbf{k}'} G_{ij} = \sum_{ij} f_{0i}^*(0) G_{ij} \varphi_{0j}(0), \quad (16)$$

即是说,这部分的贡献可以在有效质量方程的哈密顿量中形式地引入微扰:

$$\{G_{ij}\} \delta(\mathbf{r}). \quad (17)$$

其实,如果注意到

$$\int \left[\frac{1}{r^3} (\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_n) - \frac{3}{r^5} (\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{r}) \right]' d\mathbf{r} = 0,$$

就容易相信(15)中括号内的项是等于

$$\int \psi_{i\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{r^3} (\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_n) - \frac{3}{r^5} (\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{r}) \right]' \psi_{j\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

所以(16)式的 G_{ij} 相当于略去这个积分与 $\mathbf{k}, \mathbf{k}'$ 的关系:

$$G_{ij} = \int u_{i0}^*(\mathbf{r}) \left[\frac{1}{r^3} (\boldsymbol{\mu}_e \cdot \boldsymbol{\mu}_n) - \frac{3}{r^5} (\boldsymbol{\mu}_e \cdot \mathbf{r})(\boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{r}) \right] u_{j0}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (18)$$

对 H_{h_3} 的讨论,是和 H_{h_2} 类似的,

$$H_{h_3} = \frac{e}{mc} \boldsymbol{\mu}_n \cdot \frac{1}{2\pi^2 i} \int \frac{d\mathbf{q}}{q^2} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} (\mathbf{q} \times \mathbf{p}), \quad (19)$$

$\mathbf{p}$ 是动量算符, $\mathbf{p}$ 可以分为“带内”部分的矩阵元和“带间”部分的矩阵元,“带内”指的是在 $0i$ 这一组简并带内的矩阵元,它可以表为^[9]

$$\frac{m}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \{E(\mathbf{k})\} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'),$$

$\{E(\mathbf{k})\}$ 是简并带的能量矩阵(即 $|\{E(\mathbf{k})\} - \varepsilon(\mathbf{k})I| = 0$ 决定简并带能量与 $\mathbf{k}$ 的关系). 带间部分指的是除此以外的. 和对 H_{h_2} 的讨论一样, 可以看到“带内”的贡献相当于形式地在有效质量方程的哈密顿量中引入一项:

$$\frac{e}{c} \boldsymbol{\mu}_n \cdot \frac{1}{r^3} \left(\mathbf{r} \times \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial \mathbf{k}} \{E(\mathbf{k})\} \right), \mathbf{k} \rightarrow -i\nabla; \quad (20)$$

带间的部分相当于形式地在有效质量方程的哈密顿量中引入一项:

$$\{G_{ij}^{(u)}\} \delta(\mathbf{r}), \quad (21)$$

其中

$$G_{ij}^{(u)} = \int u_{i0}^* \left(\frac{1}{r^3} \left(\frac{e}{mc} \boldsymbol{\mu}_n \cdot \mathbf{r} \right) \right) u_{j0} d\mathbf{r}. \quad (22)$$

在导出(17)及(21)式时,如果計及 $\mathbf{k}, \mathbf{k}' \approx 0$, 把对它的展开取到一級时,就会得到在有效质量方程的哈密頓中有一些对 δ 函数的微商的項; 从上面的討論可見, 这些項以及(14)、(20)等比起(17)和(21)都小得多(超精细作用是一个 $\sim 1/r^3$ 的随与核的距离增大而迅速下降的作用!).

如果我們满足于不大严格但更为直观的論証, (17)和(21)是很明显的結果: 用通常的有效质量近似下波函数的形式 $\sum_i f_{0i}(\mathbf{r}) u_{0i}(\mathbf{r})$, 注意到 $f_{0i}(\mathbf{r})$ 是一个緩变函数, $u_{0i}(\mathbf{r})$ 是在原子大小范围內激烈变化的函数; 而 H_n 是一个与核的距离的立方成反比的函数, 就主要的有贡献的区域說, 可以略去 $f_{0i}(\mathbf{r})$ 的改变, 取它在核上的值, 于是就得到(17)和(21).

以上結果表明, 类似于有效质量近似, 可以把核与电子之超精细作用——包括費米接触作用与非接触項——近似地表达为作用在有效质量波函数上的某些“准”接触項[(8), (17), (21)式]; 在这些項中引入一些只决定于带边布洛赫函数的参量. 这些参量的意义見(7)、(16)和(22)式. 很显然, 它們的形式(独立参量的数目, 参量間的关系等)是可以由带边函数的对称性質来决定的, 它們的具体数值, 可以由相应的实验来确定.

二、硅的价带空穴与核的超精细作用

硅的价带电子波函数在格点上的值为零, 因此它只有(17)和(21)的作用:

$$[\{G_{ij}\} + \{G_{ij}^{(0)}\}] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n),$$

$\mathbf{r}_n$ 是核的位置. 硅的价带是四重簡并的, 价带頂属于双羣表象 Γ_8^+ , 因此 $[\{G_{ij}\} + \{G_{ij}^{(0)}\}]$ 是一个 4×4 的矩陣, 按 Γ_8^+ 表象变换下不变. 从它們的定义可見, 它們同时又是核磁矩 μ_n 的三个分量的綫性函数; 由于 $\mu_{nx}, \mu_{ny}, \mu_{nz}$ 在对称变换下的变化是和磁場強度的分量相同的, 因此和累庭根 (J. M. Luttinger)^[12] 討論磁場下空穴的哈密頓量的性質一样, 价带的对称性質决定了 $\{G_{ij} + G_{ij}^{(0)}\}$ 的最一般的形式:

$$S_1(J_x \mu_{nx} + J_y \mu_{ny} + J_z \mu_{nz}) + S_2(J_x^2 \mu_{nx} + J_y^2 \mu_{ny} + J_z^2 \mu_{nz}), \quad (23)$$

S_1, S_2 是常数, J_x, J_y, J_z 是角动量的三个分量在 $j = 3/2$ 上的表象. 如果把价带頂的四个函数选作:

$$\left. \begin{aligned} u_{01} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X + iY)\alpha, & u_{02} &= \sqrt{\frac{2}{3}}Z\alpha - \sqrt{\frac{1}{6}}(X + iY)\beta, \\ u_{03} &= -\sqrt{\frac{1}{6}}(X - iY)\alpha - \sqrt{\frac{2}{3}}Z\beta, & u_{04} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iY)\beta, \end{aligned} \right\} \quad (24)$$

其中 X, Y, Z 是坐标空間的波函数, 构成 Γ_{25}^+ 的基, α, β 是自旋向上与向下的态. 則

$$J_x = \begin{vmatrix} 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{vmatrix}, \quad J_y = \begin{vmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}i & 0 & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}i & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2}i \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2}i & 0 \end{vmatrix}, \quad J_z = \begin{vmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{vmatrix}; \quad (25)$$

把(24)代入(18)和(22),得到 H_{h_s} 的贡献是:

$$a(J_x\mu_{nx} + J_y\mu_{ny} + J_z\mu_{nz}) + b(J_x^3\mu_{nx} + J_y^3\mu_{ny} + J_z^3\mu_{nz}), \quad (26)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} a &= \left(-\frac{23}{12}(A-B) - \frac{9}{2}C \right) \frac{e\hbar}{mc}, \quad b = (A-B+2C) \frac{e\hbar}{mc}, \\ A &= \int \frac{y^2}{r^5} X^2 d\mathbf{r}, \quad B = \int \frac{x^2}{r^5} X^2 d\mathbf{r}, \quad C = \int \frac{xy}{r^5} XY d\mathbf{r}; \end{aligned} \right\} \quad (27)$$

H_{h_s} 的贡献是:

$$a_1(J_x\mu_{nx} + J_y\mu_{ny} + J_z\mu_{nz}), \quad (28)$$

其中

$$\left. \begin{aligned} a_1 &= (2/3)(B_1 - A_1) \frac{e\hbar}{mc}, \\ A_1 &= \int \frac{1}{r^3} Xy \frac{\partial Y}{\partial x} d\mathbf{r}, \quad B_1 = \int \frac{1}{r^3} Xx \frac{\partial Y}{\partial y} d\mathbf{r}; \end{aligned} \right\} \quad (29)$$

一般表达式中系数: $S_1 = (a + a_1)$, $S_2 = b$.

刘 (L. Liu) 应用正交平面波方法计算 Si 价带自旋轨道分裂值的工作^[13] 中已经证明价带电子状态在 Si 核的附近主要具有 P 函数的性质。因此, 近似地取核附近的轨道波函数为

$$X \simeq f(r) \frac{x}{r}, \quad Y = f(r) \frac{y}{r}, \quad Z = f(r) \frac{z}{r} \quad (30)$$

代入(26)–(29)中, 引入

$$\Delta = \pi \int_0^\infty \frac{|f(r)|^2}{r} dr, \quad (31)$$

容易得到

$$a = -\frac{8}{45} \left(\frac{e\hbar}{mc} \right) \Delta, \quad b = 0, \quad a_1 = \frac{9}{8} \left(\frac{e\hbar}{mc} \right) \Delta; \quad (32)$$

即

$$S_1 = \frac{32}{45} \frac{e\hbar}{mc} \Delta, \quad S_2 = 0. \quad (33)$$

在原子的超精细结构的研究中, 常常从自旋轨道分裂 (即精细结构) 来估计超精细作用常数 [例如可参看柯普菲曼 (H. Kopfermann) 的专著^[14]]. 自旋轨道作用也主要是决定于核邻近的性质的, 假使认为在核邻近位场是:

$$V(r) \approx -\frac{Z}{r} e^2, \quad (34)$$

容易得到 Γ_8^+ 与 Γ_7^+ 的裂开能量是:

$$\Delta W = \frac{3}{4} \left(\frac{e\hbar}{mc} \right)^2 Z (B_1 - A_1), \quad (35)$$

B_1, A_1 是 (29) 所定义的。如果进一步认为轨道波函数是 (30) 式给出的, 把核磁矩算符 μ_n 表作 $\mu_{n_0} \mathbf{I}_n$, $\mathbf{I}_n$ 是核自旋算符; 则相互作用参量 $S_1 \mu_{n_0}$ 可表达为

$$S_1 \mu_{n_0} = \frac{32}{45} \frac{\mu_{n_0}}{\left(\frac{e\hbar}{mc} \right)} \left(\frac{\Delta W}{Z} \right). \quad (36)$$

这正是原子光谱理论中的哥斯密特 (Goudsmit) 公式^[15]。(36) 式是假定波函数在每一个原子上归一化的。在能带论的讨论中常常是采取 $\int_{\text{元胞}} |\psi_k|^2 d\mathbf{r} = 1$ 的归一化更为方便。因此对元胞中有二个原子的情形, 一个核的超精细作用应是 (36) 除以 2。Si²⁹ 的 $I = 1/2$, $\mu_{n_0} = 1.1098 \mu_N$ (μ_N 是核磁子, 等于 5.04929×10^{-24} 尔格/高斯); Si 的 $\Delta W = 0.044$ 电子伏; 如果认为 $Z = \text{Si}$ 原子核的电荷 = 14, 则得到

$$S_1 \mu_{n_0} = 0.54 \times 10^{-18} \text{ 尔格.} \quad (37)$$

但显然, 选 $Z = 14$ 完全不顾内层电子对核的屏蔽是不合适的。巴涅和斯密斯 (R. G. Barnes, 和 W. V. Smith)^[16] 根据经验事实概括出在原子光谱中这个屏蔽作用的选取规则; 对 *P* 轨道电子来说, Z 等于原子核电荷减 4; 如果认为这规则在固体中的情况还成立, 则对 Si 来说,

$$S_1 \mu_{n_0} = 0.759 \times 10^{-18} \text{ 尔格.} \quad (38)$$

这种估计当然是比较粗糙的, 以后我们还要指出由于对多电子效应的关系是不同的, 直接由自旋轨道作用来估计核的超精细作用是不完全的, 象上面的估计, 对电四极矩的超精细作用才是比较完全的。

下面我们直接从实验值估计这个参量。关于 Si²⁹ 核和价带空穴的超精细作用, 目前只有核磁弛豫的实验, 因此以下将从理论上分析 *p* 型 Si 的核磁弛豫。

三、*p* 型硅的核磁弛豫时间

舒尔曼等^[7]观察 *p* 型 Si 中 Si²⁹ 核的核磁弛豫时间, 发现 $1/\tau$ 和载流子浓度成正比, 这说明这种弛豫完全是由核和空穴的相互作用引起的。由于 Si²⁹ 核没有电四极矩, 晶格振动不能对核自旋发生作用。只有载流子和核的超精细作用使核自旋倒向, 引起 Si²⁹ 核的自旋晶格弛豫。对简单带只有费米接触作用情况, 布伦别格^[5]进行过理论计算。这时接触作用对电子来说是一个与电子和核的自旋都有关的一个 δ 函数势, 它能够在引起载流子的散射的同时改变核自旋的取向, 计算它引起的所有散射中核自旋的倒向的总几率, 就可以得到核磁弛豫时间 τ_n 。在前面我们已经把空穴和 Si²⁹ 核的超精细作用写成一个“准”接触项即 δ 函数 (对有效质量波函数) 势的形式, 自由空穴的有效质量波函数是一些平面波; 因此可以相似地来处理这里的核磁弛豫问题, 不过这里要复杂一些。由于空穴带是四重简并的, 而且它们都是自旋和轨道强烈地耦合起来的态, 这时相应于带的自旋就是前一节的算符 $\mathbf{J}$; 准接触势如前节证明的可写为

$$S_1 \mu_{n_0} \mathbf{J} \cdot \mathbf{I}_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \quad (39)$$

自旋态有四个本征态, 某一波矢的自由空穴态 (轻和重空穴) 又是这四个本征态的重新组合, 所以计算 (39) 式引起空穴散射同时发生核自旋倒向的几率的过程, 比布伦别格等处理的问题复杂一些, 而类似于价带迁移现象的严格理论 (例如文献 [17])。

首先应解出空穴带波函数的自旋结构; 可以把价带的有效质量哈密顿写作¹⁾:

1) 由于核磁共振的磁场是弱的, 所以忽略了磁场对电子运动的影响, 由于计算的是总几率, 波函数的选法不影响最后结果。

$$\begin{vmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{vmatrix}, \quad (40)$$

其中

$$\begin{aligned} F &= -\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + \frac{1}{2}(L+M)(k_x^2 + k_y^2) + Mk_x^2\right), \\ G &= -\left(\frac{\hbar^2}{2m}k^2 + \frac{1}{6}(L+5M)(k_x^2 + k_y^2) + \frac{1}{3}(M+2L)k_x^2\right), \\ H &= \frac{1}{\sqrt{3}}Nk_x(k_y + ik_x), \\ I &= -\frac{1}{\sqrt{12}}((L-M)(k_x^2 - k_y^2) - 2iNk_xk_y), \end{aligned}$$

L, M, N 是价带参量^[18]。它的本征值是:

$$E_{l,h}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}(F+G) \pm A, \quad (41)$$

其中

$$A = \left[\left(\frac{F-G}{2} \right)^2 + HH^* + II^* \right]^{1/2}, \quad (42)$$

l, h 分别记重和轻空穴。每一个都是二重简并的, 本征矢量可写作:

$$\left. \begin{aligned} c_{l_1}(\mathbf{k}) &= d_l \begin{pmatrix} I \\ 0 \\ -\left(\frac{F-G}{2} - A\right) \\ -H^* \end{pmatrix}, & c_{l_2}(\mathbf{k}) &= d_l \begin{pmatrix} H \\ -\left(\frac{F-G}{2} - A\right) \\ 0 \\ I^* \end{pmatrix}; \\ c_{h_1}(\mathbf{k}) &= d_h \begin{pmatrix} I \\ 0 \\ -\left(\frac{F-G}{2} + A\right) \\ -H^* \end{pmatrix}, & c_{h_2}(\mathbf{k}) &= d_h \begin{pmatrix} H \\ -\left(\frac{F-G}{2} + A\right) \\ 0 \\ I^* \end{pmatrix}; \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

其中

$$d_{l,h} = \left\{ 2 \left[|I|^2 + |H|^2 + \left(\frac{1}{2}(F-G) \right)^2 \right] \mp A(F-G) \right\}^{-1/2}.$$

(39)所引起的电子态间的跃迁矩阵元可以写出(为简单计, 以下略去不写 $S_1\mu_{n_0}$),

$(l1, \mathbf{k}) \rightarrow (l1, \mathbf{k}')$:

$$\begin{aligned} d_l(\mathbf{k})d_l(\mathbf{k}') &\left\{ \frac{\sqrt{3}}{2} \left[\left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}'} + \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} H_{\mathbf{k}} \right] \hat{I}_x + \right. \\ &+ \frac{\sqrt{3}}{2} i \left[H_{\mathbf{k}'} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} - H_{\mathbf{k}}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_y + \\ &\left. + \left[\frac{3}{2} I_{\mathbf{k}} I_{\mathbf{k}'}^* - \frac{1}{2} \left[\frac{F-G}{2} - A \right]_{\mathbf{k}} \left[\frac{F-G}{2} - A \right]_{\mathbf{k}'} - \frac{3}{2} H_{\mathbf{k}}^* H_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_z \right\}; \end{aligned} \quad (44)$$

$(l1, \mathbf{k}) \rightarrow (l2, \mathbf{k}')$:

$$\begin{aligned} d_l(\mathbf{k})d_l(\mathbf{k}') & \left\{ \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \left[-I_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} - I_{\mathbf{k}'} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \right] + \right. \right. \\ & + \left. \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_x + \frac{3}{2} (H_{\mathbf{k}}^* I_{\mathbf{k}'} + H_{\mathbf{k}'}^* I_{\mathbf{k}}) \hat{I}_x + \\ & + \left[\frac{\sqrt{3}}{2} i \left[-I_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} - I_{\mathbf{k}'} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \right] + \right. \\ & + \left. \left. \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} \right] i \right] \hat{I}_y \right\}; \end{aligned} \quad (45)$$

$(l2, \mathbf{k}) \rightarrow (l2, \mathbf{k}')$:

$$\begin{aligned} d_l(\mathbf{k})d_l(\mathbf{k}') & \left\{ \frac{\sqrt{3}}{2} \left[H_{\mathbf{k}'}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} + H_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_x + \right. \\ & + \frac{\sqrt{3}}{2} i \left[H_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} - H_{\mathbf{k}'}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \right] \hat{I}_y + \\ & + \left. \left[\frac{3}{2} H_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}'} + \frac{1}{2} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} - \frac{3}{2} I_{\mathbf{k}}^* I_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_z \right\}; \end{aligned} \quad (46)$$

$(l2, \mathbf{k}) \rightarrow (l1, \mathbf{k}')$:

$$\begin{aligned} d_l(\mathbf{k})d_l(\mathbf{k}') & \left\{ \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \left[I_{\mathbf{k}'}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} + I_{\mathbf{k}}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} \right] + \right. \right. \\ & + \left. \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_x + \left[\frac{\sqrt{3}}{2} i \left[-I_{\mathbf{k}}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} - \right. \right. \\ & - \left. \left. I_{\mathbf{k}'}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \right] + i \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_y + \\ & + \left. \frac{3}{2} [H_{\mathbf{k}} I_{\mathbf{k}'}^* + H_{\mathbf{k}'} I_{\mathbf{k}}^*] \hat{I}_z \right\}; \end{aligned} \quad (47)$$

对于 $(h1, \mathbf{k}) \rightarrow (h1, \mathbf{k}')$ 、 $(h1, \mathbf{k}) \rightarrow (h2, \mathbf{k}')$ 、 $(h2, \mathbf{k}) \rightarrow (h2, \mathbf{k}')$ 和 $(h2, \mathbf{k}) \rightarrow (h1, \mathbf{k}')$ 等四个过程, 只要把上面四个表达式中所有 $\left(\frac{F-G}{2} - A \right)$ 改为 $\left(\frac{F-G}{2} + A \right)$ 即可。在这里记号的意义是这样的: 例如 $(l1, \mathbf{k}) \rightarrow (l2, \mathbf{k}')$ 是指从 $l1$ 带波矢为 $\mathbf{k}$ 的态散射到 $l2$ 带波矢为 $\mathbf{k}'$ 的态的过程; $H_{\mathbf{k}}$ 是指 H 表达式中波矢用 $\mathbf{k}$ 代入。除去以上八个过程外, 还有八个过程, 分别写出如下

$(l1, \mathbf{k}) \rightarrow (h1, \mathbf{k}')$:

$$\begin{aligned} d_l(\mathbf{k})d_h(\mathbf{k}') & \left\{ \frac{\sqrt{3}}{2} \left[\left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}'} + \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} H_{\mathbf{k}}^* \right] \hat{I}_x + \right. \\ & + \frac{\sqrt{3}}{2} i \left[H_{\mathbf{k}'} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} - H_{\mathbf{k}}^* \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_y + \\ & + \left. \left[\frac{3}{2} I_{\mathbf{k}} I_{\mathbf{k}'} - \frac{1}{2} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} - \frac{3}{2} H_{\mathbf{k}}^* H_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_z \right\}; \end{aligned} \quad (48)$$

$(l1, \mathbf{k}) \rightarrow (h2, \mathbf{k}')$:

$$\begin{aligned} d_l(\mathbf{k})d_h(\mathbf{k}') & \left\{ \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \left[-I_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} - I_{\mathbf{k}'} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \right] + \right. \right. \\ & + \left. \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_x + \frac{3}{2} [H_{\mathbf{k}}^* I_{\mathbf{k}'} + H_{\mathbf{k}'}^* I_{\mathbf{k}}] \hat{I}_x + \\ & + \left[\frac{\sqrt{3}}{2} i \left[-I_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} - I_{\mathbf{k}'}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \right] + \right. \\ & + \left. \left. \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} i \right] \hat{I}_y \right\}; \end{aligned} \quad (49)$$

$(l2, \mathbf{k}) \rightarrow (h1, \mathbf{k}')$:

$$\begin{aligned} d_l(\mathbf{k})d_h(\mathbf{k}') & \left\{ \left[\frac{\sqrt{3}}{2} \left[-I_{\mathbf{k}'}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} - I_{\mathbf{k}}^* \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} \right] + \right. \right. \\ & + \left. \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \right] \hat{I}_x + \left[\frac{\sqrt{3}}{2} i \left[I_{\mathbf{k}}^* \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} + \right. \right. \\ & + \left. \left. I_{\mathbf{k}'}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \right] + \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} i \right] \hat{I}_y + \\ & + \left. \frac{3}{2} [H_{\mathbf{k}} I_{\mathbf{k}'}^* + H_{\mathbf{k}'} I_{\mathbf{k}}^*] \hat{I}_x \right\}; \end{aligned} \quad (50)$$

$(l2, \mathbf{k}) \rightarrow (h2, \mathbf{k}')$:

$$\begin{aligned} d_l(\mathbf{k})d_h(\mathbf{k}') & \left\{ \frac{\sqrt{3}}{2} \left[H_{\mathbf{k}'}^* \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} + H_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_x + \right. \\ & + \frac{\sqrt{3}}{2} i \left[H_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} - H_{\mathbf{k}'} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \right] \hat{I}_y + \\ & + \left. \left[\frac{3}{2} H_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}'} + \frac{1}{2} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} + A \right)_{\mathbf{k}'} - \frac{3}{2} I_{\mathbf{k}}^* I_{\mathbf{k}'} \right] \hat{I}_x \right\}; \end{aligned} \quad (51)$$

另外四个过程 $(h1, \mathbf{k}) \rightarrow (l1, \mathbf{k}')$, $(h2, \mathbf{k}) \rightarrow (l1, \mathbf{k}')$, $(h1, \mathbf{k}') \rightarrow (l2, \mathbf{k})$, 和 $(h2, \mathbf{k}) \rightarrow (l2, \mathbf{k}')$ 只要把这四个表达式中 $\mathbf{k}$ 和 $\mathbf{k}'$ 互换并取复共轭即可。在所有这些表达式中还包含着核磁矩算符, 对 Si^{29} 说, $I = 1/2$, 写出取向为 (Θ, Φ) 的自旋波函数

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} \cos \frac{\Theta}{2} e^{-i\frac{\Phi}{2}} \\ \sin \frac{\Theta}{2} e^{i\frac{\Phi}{2}} \end{pmatrix}, \quad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\Theta}{2} e^{-i\frac{\Phi}{2}} \\ -\cos \frac{\Theta}{2} e^{i\frac{\Phi}{2}} \end{pmatrix}; \quad (52)$$

把上面这些过程的矩阵元在 $|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$ 之间求积, 就得到在这些过程中使核自旋倒向的跃迁矩阵元。把这矩阵元平方乘以 $2\pi/\hbar$, 就得到在这个载流子散射过程中发生核自旋倒向的几率。载流子散射前后的能量差是核自旋的二个态在外磁场下的能量差, 这是一个非常小的量, 因此可以说载流子散射前后能量相等。在我们的情况下, 一般可认为载流子是服从波耳兹曼统计的, 因此可以略去末态被载流子占据的几率。这样一来, 要求一个过程中总的核自旋倒向几率, 应该首先固定初态, 把由 $\mathbf{k}$ 到 $\mathbf{k}'$ 的核自旋倒向几率对所有满足

与 $\mathbf{k}$ 态能量相同的末态 $\mathbf{k}'$ 求和, 然后初态载流子占据的几率对所有的初态求和. 最后总的核自旋倒向几率等于各个过程的总和. 硅的价带等能面是扭曲的 [见(41)式], 因而初态与末态载流子能量相等的条件就变得很复杂; 我们近似地略去等能面的扭曲性 (一般价带的迁移现象理论也都是这样的), 把(41)式近似地看作

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2m_l} k^2, \quad E_h = \frac{\hbar^2}{2m_h} k^2, \quad (53)$$

等能面成为球状的, 计算就简单得多了.

只举一个例子说明计算过程, $(l1, \mathbf{k}) \rightarrow (l1, \mathbf{k}')$ 的过程中核倒向的矩阵元可从(48), (52)式得到:

$$\begin{aligned} M_{l1, \mathbf{k}; l1, \mathbf{k}'} = & \frac{1}{2} d_l(\mathbf{k}) d_l(\mathbf{k}') \left\{ \sqrt{3} H_{\mathbf{k}'} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \sin^2 \frac{\Theta}{2} e^{i\varphi} - \right. \\ & - \sqrt{3} H_{\mathbf{k}'} \left[\frac{F-G}{2} - A \right]_{\mathbf{k}'} \cos^2 \frac{\Theta}{2} e^{-i\varphi} + \left[\frac{3}{2} I_{\mathbf{k}} I_{\mathbf{k}'} - \right. \\ & \left. \left. - \frac{1}{2} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}'} - \frac{3}{2} H_{\mathbf{k}} H_{\mathbf{k}'} \right] \sin \Theta \right\}. \end{aligned} \quad (54)$$

从(53)可见 $|\mathbf{k}| = |\mathbf{k}'|$, 引入 $\frac{2m}{\hbar^2} L = l$, $\frac{2m}{\hbar^2} M = m'$, $\frac{2m}{\hbar^2} N = n$, $\mathbf{k}$ 的方向用 θ, φ 标志, 则

$$\begin{aligned} H(\mathbf{k}) &= \frac{i}{2\sqrt{3}} \frac{\hbar^2}{2m} k^2 n \sin 2\theta e^{-i\varphi}; \\ I(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{\sqrt{12}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} k^2 \right) \sin^2 \theta ((l - m') \cos 2\varphi - in \sin 2\varphi); \\ \left(\frac{F-G}{2} \pm A \right)_{\mathbf{k}} &= \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \left\{ \frac{1}{3} (l - m') \left(\cos^2 \theta - \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) \pm \right. \\ & \left. \pm \left[\left(\frac{1}{3} (l - m') \right)^2 + \frac{1}{3} (n^2 - (l - m')^2) \sin^2 \theta \left(\cos^2 \theta + \frac{1}{4} \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi \right) \right]^{1/2} \right\}; \\ d_{l,1}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hbar^2}{2m} k^2 \right)^{-1} \left\{ \left(\frac{l - m'}{3} \right)^2 + \frac{1}{3} (n^2 - (l - m')^2) \sin^2 \theta \left[\cos^2 \theta + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{4} \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi \right] \mp \left[\left(\frac{l - m'}{3} \right)^2 + \frac{1}{3} (n^2 - (l - m')^2) \sin^2 \theta \left(\cos^2 \theta + \right. \right. \right. \\ & \left. \left. \left. + \frac{1}{4} \sin^2 \theta \sin^2 2\varphi \right) \right]^{1/2} \frac{l - m'}{3} \left(\cos^2 \theta - \frac{1}{2} \sin^2 \theta \right) \right\}^{-1/2}; \end{aligned} \quad (55)$$

容易看出有下面等式:

$$\left. \begin{aligned} \int \sin \theta d\theta d\varphi d_l^2(\mathbf{k}) H(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}) &= 0, \\ \int \sin \theta d\theta d\varphi d_l^2(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}) \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} &= 0, \\ \int \sin \theta d\theta d\varphi d_l^2(\mathbf{k}) H(\mathbf{k}) \left(\frac{F-G}{2} - A \right)_{\mathbf{k}} &= 0, \\ \int \sin \theta d\theta d\varphi d_l(\mathbf{k}) d_h(\mathbf{k}) I(\mathbf{k}) H(\mathbf{k}) &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (56)$$

等等。总之所有交叉项的积分均为零。

对末态求积现在是对 θ' , φ' 求积, 而按(53)式, 载流子分布函数也只和 $|\mathbf{k}|$ 有关, 所以我們也可以先对初态的 θ , φ 求积, 即是說計算

$$\frac{2\pi}{\hbar} \int |M_{l_1 k, l_1 k'}|^2 \delta[E_{l_1}(k) - E_{l_1}(k')] \sin \theta d\theta d\varphi \sin \theta' d\theta' d\varphi', \quad (57)$$

利用(56), 引入

$$\left. \begin{aligned} P_1 &= \int \sin \theta d\theta d\varphi d_l^2 \left(\frac{F-G}{2} - A \right)^2, & P_2 &= \int \sin \theta d\theta d\varphi d_l^2 |H|^2, \\ P_3 &= \int \sin \theta d\theta d\varphi d_l^2 |I|^2; \end{aligned} \right\} \quad (58)$$

显然, 它們都是与 $|k|$ 无关的。这时可以証明(57)式等于

$$\frac{\pi}{2\hbar} \left[\frac{3}{2} P_1 P_2 (1 + \cos^2 \Theta) + \left(\frac{9}{4} P_3^2 + \frac{1}{4} P_1^2 + \frac{9}{4} P_2^2 \right) \sin^2 \Theta \right] \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_l} (k^2 - k'^2) \right]. \quad (59)$$

($l2, \mathbf{k}$) $\rightarrow$ ($l2, \mathbf{k}'$) 的结果是和这个相同的; 同样可以得到和(57)相似的积分,

$$\left. \begin{aligned} (l1, \mathbf{k}) \rightarrow (l2, \mathbf{k}'): & \frac{\pi}{2\hbar} \left[(6P_1 P_3 + 4P_1^2) \sin^4 \frac{\Theta}{2} + \right. \\ & \left. + \frac{9}{2} P_2 P_3 \sin^2 \Theta \right] \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_l} (k^2 - k'^2) \right], \\ (l2, \mathbf{k}) \rightarrow (l1, \mathbf{k}'): & \frac{\pi}{2\hbar} \left[(6P_1 P_3 + 4P_1^2) \cos^4 \frac{\Theta}{2} + \right. \\ & \left. + \frac{9}{2} P_2 P_3 \sin^2 \Theta \right] \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_l} (k^2 - k'^2) \right], \end{aligned} \right\} \quad (60)$$

对 h 带內的四个散射过程, 可以引入

$$\left. \begin{aligned} P'_1 &= \int \sin \theta d\theta d\varphi d_h^2 \left(\frac{F-G}{2} + A \right)^2, & P'_2 &= \int \sin \theta d\theta d\varphi d_h^2 |H|^2, \\ P'_3 &= \int \sin \theta d\theta d\varphi d_h^2 |I|^2; \end{aligned} \right\} \quad (61)$$

写出与(59), (60)平行的结果, 只需要把(59), (60)中所有 $P_{1,2,3}$ 换以 $P'_{1,2,3}$, δ 函数换以 $\delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_h} (k^2 - k'^2) \right]$.

对 l, h 之間的过程, 亦可得到

$$\begin{aligned} (l1, \mathbf{k}) \rightarrow (h1, \mathbf{k}'): & \frac{\pi}{2\hbar} \left[\left(3P_1 P'_2 \sin^4 \frac{\Theta}{2} + 3P'_1 P_2 \cos^4 \frac{\Theta}{2} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{\pi}{2\hbar} \left(\frac{9}{4} P_3 P'_3 + \frac{1}{4} P_1 P'_1 + \frac{9}{4} P_2 P'_2 \right) \right] \sin^2 \Theta \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m_h} k'^2 - \frac{\hbar^2}{2m_l} k^2 \right), \end{aligned} \quad (62)$$

($l2, \mathbf{k}$) $\rightarrow$ ($h2, \mathbf{k}'$): 与(62)式相同,

$$\begin{aligned} (l1, \mathbf{k}) \rightarrow (h2, \mathbf{k}'): & \frac{\pi}{2\hbar} \left[[3(P_3 P'_1 + P'_3 P_1) + 4P_1 P'_1] \sin^4 \frac{\Theta}{2} + \right. \\ & \left. + \frac{9}{4} (P_2 P'_3 + P'_2 P_3) \sin^2 \Theta \right] \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m_l} k^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} k'^2 \right), \end{aligned} \quad (63)$$

$$(l2, \mathbf{k}) \rightarrow (h1, \mathbf{k}'): \frac{\pi}{2\hbar} \left[(3(P_3P'_1 + P'_3P_1) + 4P_1P'_1) \cos^4 \frac{\Theta}{2} + \right. \\ \left. + \frac{9}{4} (P_2P'_3 + P_3P'_2) \sin^2 \Theta \right] \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m_l} k^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} k'^2 \right). \quad (64)$$

由于实际上核磁共振是对粉末样品进行的, 晶体取向与外磁场的关系是任意的, 所以还要把以上的结果对 (Θ, Φ) 求平均; 在这样做了之后, 可以得到(把同一类型的 1, 2 加起来了)

$$\left. \begin{aligned} l \rightarrow l: & \quad \frac{\pi}{2\hbar} [3(P_1 + P_2 + P_3)^2 - 2(P_1P_2 + P_1P_3)] \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_l} (k^2 - k'^2) \right]; \\ l \rightarrow h: & \quad \frac{\pi}{2\hbar} (3P_1P'_1 + 3P_2P'_2 + 3P_3P'_3 + 2P_1P'_2 + 2P'_1P_2 + 2P'_1P_3 + \\ & \quad + 2P'_3P_1 + 3P_2P'_3 + 3P'_2P_3) \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m_l} k^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} k'^2 \right); \\ h \rightarrow h: & \quad \frac{\pi}{2\hbar} [3(P'_1 + P'_2 + P'_3)^2 - 2(P'_1P'_2 + P'_1P'_3)] \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_h} (k^2 - k'^2) \right]; \\ h \rightarrow l: & \quad \frac{\pi}{2\hbar} (3P_1P'_1 + 3P_2P'_2 + 3P_3P'_3 + 2P'_1P_2 + 2P_1P'_2 + 2P'_1P_3 + \\ & \quad + 2P'_3P_1 + 3P_2P'_3 + 3P'_2P_3) \delta \left(\frac{\hbar^2}{2m_l} k'^2 - \frac{\hbar^2}{2m_h} k^2 \right). \end{aligned} \right\} \quad (65)$$

$P_{1,2,3}$ 和 $P'_{1,2,3}$ 在扭曲等能面的情况只能用数值积分求得。如略去扭曲性, 即认为 $l - m' = n$, 则

$$\left. \begin{aligned} P_1 = 2\pi, \quad P_2 = \frac{4}{3}\pi, \quad P_3 = \frac{2}{3}\pi; \\ P'_1 = 2\pi, \quad P'_2 = 4\pi - \frac{16}{3}\pi \frac{1}{\sqrt{3}} \operatorname{tg}^{-1} \sqrt{3}, \quad P'_3 = -2\pi + \frac{16}{3}\pi \frac{1}{\sqrt{3}} \operatorname{tg}^{-1} \sqrt{3}, \end{aligned} \right\} \quad (66)$$

其实我们要的只是 $P'_2 + P'_3, P_2 + P_3, P'_1, P_1$ 这四个量。实际数值积分结果表明这些量是和(66)式很相近的。因此我们取 $P_1 = P'_1 = 2\pi, P_2 + P_3 = P'_2 + P'_3 = 2\pi$; 代入(65)式, 乘上初态载流子填充几率, 然后对 $|k|$ 和 $|k'|$ 求积, 得到由 l 空穴到 h 空穴的散射引起核自旋倒向的总几率是:

$$\frac{20}{\hbar} \pi^2 \left(\frac{1}{8\pi^3} \right)^2 \left(\frac{4N}{m_h^{3/2} + m_l^{3/2}} \right) \left(\frac{\pi \hbar^2}{2k_0 T} \right)^{3/2} \int_0^\infty k'^2 dk' k^2 dk e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_l k_0 T} - \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_h k_0 T}} \delta \left[\frac{\hbar^2}{2m_l} (k^2 - k'^2) \right] = \\ = \frac{5}{2} \frac{(k_0 T)^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{1}{\hbar^4} \frac{m_l^3}{m_h^{3/2} + m_l^{3/2}} N, \quad (67)$$

其中 N 是空穴浓度, T 是温度, k_0 是波耳兹曼常数。同样方法可得到

$$h \rightarrow h: \quad \frac{5}{2} \frac{(k_0 T)^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} \cdot \frac{1}{\hbar^4} \cdot \frac{m_h^3}{m_h^{3/2} + m_l^{3/2}} N, \quad (68)$$

$$l \rightarrow h: \quad \frac{5}{2} \frac{(k_0 T)^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} \cdot \frac{1}{\hbar^4} \cdot \frac{m_h^{3/2} m_l^{3/2}}{m_h^{3/2} + m_l^{3/2}} N, \quad (69)$$

$$h \rightarrow l: \quad \text{与 } l \rightarrow h \text{ 相同}, \quad (70)$$

把(67)到(70)加起来, 设 τ_n 为弛豫时间, 则有

$$\frac{1}{2\tau_n} = \frac{5}{2} \frac{(k_0 T)^{1/2}}{(2\pi)^{3/2}} \frac{N}{\hbar^4} (m_h^{3/2} + m_l^{3/2}) |S_1 \mu_{n_0}|^2. \quad (71)$$

用 $m_h = m / \left(|A| + \sqrt{B^2 + \frac{1}{6}C^2} \right)$, $m_l = m / \left(|A| - \sqrt{B^2 + \frac{1}{6}C^2} \right)$; A, B, C 选用^[19]: $A = -4.28$, $B = -0.75$, $C^2 = 27.5$; 代入(70)式. 再根据舒尔曼^[7]的结果, 在室温下对浓度为 2×10^{17} 厘米⁻³的样品 $\tau_n = 80$ 分钟; 另外, 考虑到波函数是按第二节末尾那样归一化的, (70)式还应当乘上元胞体积的平方, 这样从(71)和实验值的比较, 一定得¹⁾

$$S_1 \mu_{n_0} = 1.05 \times 10^{-18} \text{ 尔格}. \quad (72)$$

本节估计的参量值与第二节估计的是相近的. 这进一步说明 p 型硅的核磁弛豫是由于空穴与核的非接触作用引起的.

四、討 論

本节讨论几个问题.

1. 第二节由自旋轨道耦合估计超精细作用参量, 一般说来, 不能希望与真实值(实验值)符合得很好, 这在原子光谱中是普遍的现象(例如可参看文献[14]). 这不仅是因为象屏蔽电荷这样一些简化具有的不准确性, 而且是因为磁的超精细作用包含着比较显著的多电子效应, 而前面的理论是单电子的; 自旋轨道效应与此不同, 多电子效应很小, 原则上可由单电子波函数相当准确地计算出来.

对磁的超精细作用的多电子效应, 在原子光谱中是费米和色格里 (E. Fermi, E. Segré)^[20]所指出的组态混合作用; 原来没有费米接触作用的单电子组态, 由于电子间相互作用而混入有费米接触作用的组态(注意接触作用总是显著地大于非接触作用的), 而且对于由交换作用混合进来的组态来说, 它对磁的超精细作用的贡献是与其系数成线性而不是成平方关系的, 所以对磁超精细作用的贡献就很显著^[21, 22, 23]. 同样的现象在固体里也是存在的, 由于载流子和全部价电子的库仑相互作用, 每一个载流子态实际都不是单电子的(裸的), 而是伴随着激发出来的一系列的虚的电子空穴对^[23, 24], 按照文献[24]的说法, 把它称为电子极化子. 写出这样的“极化”了的电子态, 就可以看出和核的磁超精细作用中, 它里面包含的总波矢为零的虚的电子空穴对的贡献是和其系数成正比的, 同时还正比于这电子态在核上的值与空穴态在核上的值的乘积, 而且可以证明, 这部分虚激发也主要是交换作用的结果. 我们也可以证明, 这时超精细作用还可以采用第一、二节中的形式, 只是相应的参量的含义不再是原来的单电子积分了. 也不难看出, 对自旋轨道耦合来说, 没有这种效应. 同样对电四极矩引起的超精细作用也不存在这种效应. 这样论证的过程是形式的, 这里就不赘述了.

2. 对 $I > 1/2$ 的核有电四极矩作用, 完全仿照前面一、二节所作的一样, 可以把载流子和核电四极矩的作用表达为一个作用在有效质量波函数上的“准”接触作用. 例如, 对价带空穴可以证明这一作用的一般形式是:

1) 由于(14)和(20)所引起的弛豫时间, 很简单的估计就可以说明是 $10^8 - 10^9$ 秒, 因此忽略了它们的贡献.

$$-\frac{e^2 Q}{I(2I-1)} \left(\frac{4\pi}{5}\right)^{1/2} \left[b(\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{I}})^2 + \frac{b}{2}(\mathbf{J} \cdot \hat{\mathbf{I}}) - \frac{1}{2} \left(b + \frac{a}{\sqrt{3}}\right) [\{J_y, J_x\}\{I_y, I_x\} + \{J_y J_x\}\{I_y I_x\} + \{J_x J_y\}\{I_x I_y\}] - \frac{b}{3} J(J+1)I(I+1) \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \quad (73)$$

其中, $\hat{\mathbf{I}}$ 是核自旋算符, I 是核自旋值, Q 是所谓核四极矩值(定义见文献 [14]), 符号 $\{A, B\} = AB + BA$, a, b 由下列积分定义:

$$\left. \begin{aligned} a &= \langle X | \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{i} \left(\frac{1}{r^3}\right) (Y_2^2 - Y_2^{-2}) | Y \rangle, \\ b &= \langle Y | \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{1}{r^3}\right) (Y_2^2 + Y_2^{-2}) | Y \rangle, \end{aligned} \right\} \quad (74)$$

Y_l^m 是球谐函数。当 X, Y, Z 用(30)式近似时可得

$$a = -\sqrt{3} b = \left(\frac{4\pi}{15}\right)^{1/2} \int_0^\infty |f(r)|^2 \frac{1}{r} dr, \quad (75)$$

则(73)可简化为

$$-\frac{e^2 Q}{I(2I-1)} \left(\frac{4\pi}{5}\right)^{1/2} b \left[(\mathbf{J} \cdot \mathbf{I})^2 + \frac{1}{2}(\mathbf{J} \cdot \mathbf{I}) - \frac{1}{3} J(J+1)I(I+1) \right] \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n). \quad (76)$$

具体估计说明, 一般说来, 载流子和核电四极矩作用要比磁的超精细作用小一些, 但也不能完全忽略。

锗和大部分 III-V 族化合物的核的 I 都大于 $1/2$, 具有电四极矩。对于核磁弛豫来说, 电四极矩具有特别的意义, 因为晶格振动会引起作用到核上的电场梯度, 引起核自旋倒向。在 III-V 族化合物中已证明这机构是最主要的^[26]; Ge 的情况, 文献 [26, 27] 也证明它可能是主要的。但如按 Ge 的自旋轨道耦合分裂值是 Si 的十倍来估计其磁超精细作用的参量亦是 Si 的十倍, 则在空穴浓度超过 10^{17} 厘米⁻³ 时它对核磁弛豫的贡献亦是不容忽视的。

3. 本文讨论的是布洛赫电子和核的超精细作用, 这是因为考虑的是 Si 晶体中 Si^{29} 核和载流子的超精细作用, 在 Si^{29} 核附近的载流子波函数当然是可以用 Si 晶体的布洛赫波描写的。正象文献[4]中叙述的, 对杂质核附近的波函数用(3)式这样的有效质量波函数来描述是不恰当的。我们已可以有一种处理这问题的方法, 可以在一定意义下保留(3)式的形式, 只是对基 $\psi_{0i, \mathbf{k}}(\mathbf{r})$ 作一定改正, 这时前面所发展的形式还能在这问题中保留下来。当然相应的参量的意义和数值是不同的。关于这个问题将在以后再另文讨论。

五、结 语

以上所发展的形式, 我们以为在作某些一定推广后, 对处理半导体中电子自旋共振现象是有用的。

作者对黄昆教授的鼓励和指导表示谢意; 张綺香同志曾和作者进行多次有益的讨论, 在这里一并致谢。

参 考 文 献

- [1] Fermi, E., *Z. Physik*, **60** (1930), 320.

- Bethe, H. A., Salpeter, E. E., *Quantum mechanics of one-and two-electron atoms* (Springer-Verlag, 1957).
- [2] Bloembergen, N., Rowlong, T. J., *Acta. Metal*, **1** (1953), 731.
- [3] Masuda, Y., *J. Phys. Soc. (Japan)*, **12** (1957), 523.
- [4] Kohn, W., *Solid State Physics*, V. 5.
- [5] Bloembergen, N., *Physica*, **20** (1954), 1131; **15** (1949), 588.
- [6] Feher, G., *Phys. Rev.*, **114** (1959), 1219.
- [7] Shulman, R. G., Wyluda, B. J., *Phys. Rev.*, **103** (1956), 1127.
- [8] Ludwig, G. W., Woodbury, M. H., *Bull. Amer. Phys. Soc.*, **6** (1961), 118.
Ludwig, G. W., Woodbury, M. H., *Solid State Physics*, V. 13.
- [9] Luttinger, J. M., Kohn, W., *Phys. Rev.*, **97** (1955), 389.
- [10] Hasagawa, H., *Phys. Rev.*, **118** (1960), 1523.
- [11] Sucher, J., Foley, H., *Phys. Rev.*, **95** (1955), 966.
- [12] Luttinger, J. M., *Phys. Rev.*, **102** (1957), 1030.
- [13] Liu, L., *Phys. Rev.*, **126** (1962), 1317.
- [14] Kopfermann, H., *Kernmomente* (1956 第二版), 俄译本, Г. Конферман, Ядерный моменты (И. Л. Москва, 1960).
- [15] Goudsmit, S., *Phys. Rev.*, **43** (1933), 636.
- [16] Barnes, R. G., Smith, W. V., *Phys. Rev.*, **93** (1954), 95.
- [17] Ehrenreich, H., Overhauser, A. W., *Phys. Rev.*, **104** (1958), 331, 649.
- [18] Dresselhaus, G., Kip, A. F., Kittel, C., *Phys. Rev.*, **98** (1955), 368.
- [19] Hensel, J. C., Feher, G., *Phys. Rev.*, **129** (1963), 1041.
- [20] Fermi, E., Segré, E., *Z. Physik*, **82** (1933), 729.
- [21] Koster, G. F., *Phys. Rev.*, **86** (1952), 148.
- [22] Abragam, A., Horowitz, J., Pryce, M. H. L., *Proc. Roy. Soc.*, **230** (1955), 169.
- [23] Pratt, G. W., *Phys. Rev.*, **118** (1960), 463.
- [24] Toyozawa, Y., *Prog. Theor. Phys.*, **12** (1954), 421.
- [25] Cohen, M. H., Goodings, D. A., Heines, V., *Proc. Phys. Soc.*, **73** (1959), 811.
Goodings, D. A., *Phys. Rev.*, **123** (1961), 1706.
- [26] Mieher, R. L., *Phys. Rev.*, **125** (1962), 1537.
- [27] Wyluda, R. J., *J. Phys. Chem. Solid*, **23** (1962), 63.
- [28] 张绮香, 物理学报 (待发表).

THE HYPERFINE INTERACTION BETWEEN NUCLEONS AND HOLES OF SILICON, AND THE NUCLEAR MAGNETIC RELAXATION IN THE *p*-TYPE SILICON

KAN TZE-CHAO

(Department of Physics, Peking University)

ABSTRACT

The hyperfine interaction of the carriers in semiconductors (involving the Fermi-contact and noncontact terms) has been treated by a "pseudo-contact interaction", which acts on the effective mass wavefunction. For the Si^{29} nucleons and the holes in silicon, it can be represented by

$$\{S_1(J_x\mu_{nx} + J_y\mu_{ny} + J_z\mu_{nz}) + S_2(J_x^3\mu_{nx} + J_y^3\mu_{ny} + J_z^3\mu_{nz})\}\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n).$$

The coupling parameters S_1 and S_2 are certain integrals connecting the Bloch functions of the top of the valence band, generally $S_2 \approx 0$. Utilizing the above formula we have treated the nuclear magnetic relaxation in *p*-type silicon and obtained an expression for the relaxation time; the value of the parameter S_1 has been determined from the relaxation time and from the spin orbit splitting value at the valence band top.