

立方半导体中双空位态的电子结构 (III)*

硅中双空位态的波函数

任 尚 元 茅 德 强

(中国科学技术大学物理系)

李 名 复

(中国科学技术大学研究生院)

1986年1月6日收到

提 要

利用文献[1]中的基本方程和 Vogl 等人的紧束缚哈密顿量, 计算了硅中理想双空位的 E_g 和 E_u 态的波函数, 讨论了计算结果和 ESR 与 ENDOR 谱的比较.

一、各近邻壳层的原子坐标

我们利用文献[1]中的(5), (27), (29), (31), (32)各式, 给出硅中理想双空位的 E_g 态和 E_u 态的波函数的数值计算结果. 这里描述硅能带结构的紧束缚哈密顿量是采用 Vogl 等人^[2]的, 而计算 Green 函数所需的对布里渊区的积分用特殊点法^[3]来完成. 我们仍用 10 个特殊点. 如文献[4]给出的结果, E_g 和 E_u 态是硅中理想双空位在禁带中所引入的仅可能的两个状态, 按照我们的计算结果, 这两个能级都十分接近于硅中理想单空位在禁带中引入的 T_2 能级位置, E_g 比 E_u 略高.

现在我们首先给出硅中双空位缺陷的几个最近邻壳层的原子坐标, 并以 $a/4$ 为单位, 这里 a 为硅的晶格常数. 我们将采取与文献[1]同样的原子坐标, 将两个空位的位置分别为 $\frac{1}{2}(1, 1, 1)$ 和 $\frac{1}{2}(\bar{1}, \bar{1}, \bar{1})$, 并以离原点 $(0, 0, 0)$ 的距离来排各近邻壳层的顺序. 这样

最近邻壳层有 6 个原子, 位置为

$$\frac{1}{2}(1, 1, 1) + \{(\bar{1}, 1, 1), (1, \bar{1}, 1), (1, 1, \bar{1})\}$$

和

$$\frac{1}{2}(\bar{1}, \bar{1}, \bar{1}) + \{(1, \bar{1}, \bar{1}), (\bar{1}, 1, \bar{1}), (\bar{1}, \bar{1}, 1)\}.$$

* 中国科学院科学基金资助的课题.

这个写法的含意是,花括弧中的每一个小括弧都应加上其前面的 $\frac{1}{2}(1, 1, 1)$ 或 $\frac{1}{2}(\bar{1}, \bar{1}, \bar{1})$ 才给出相应的原子位置. 下面我们都采用这样的写法. 还可以注意到,后 3 个原子位置是前面 3 个原子位置对原点的反演,前面 3 个原子位置中的两个,也可以通过其中的一个,通过 D_{3d} 的点群作用而得到,因此,实际上我们只需对于每一壳层,列出其中一个典型原子位置即可. 这样次近邻壳层有 12 个原子,其典型原子位置为

$$\frac{1}{2}(1, 1, 1) + (\bar{2}, 2, 0).$$

三近邻有两种形式,各有 6 个原子. 第 1 种典型原子位置为 $\frac{1}{2}(1, 1, 1) + (0, 2, 2)$. 第 2 种典型原子位置为 $\frac{1}{2}(1, 1, 1) + (3, \bar{1}, \bar{1})$.

四近邻有 6 个原子,其典型原子位置为 $\frac{1}{2}(1, 1, 1) + (3, 1, 1)$.

五近邻也有两种形式. 第 1 种有 6 个原子,其典型原子位置为

$$\frac{1}{2}(1, 1, 1) + (4, 0, 0).$$

第 2 种有 12 个原子. 典型原子位置为 $\frac{1}{2}(1, 1, 1) + (\bar{3}, 3, 1)$.

六近邻壳层也有两种形式,各包含有 6 个原子. 第 1 种典型原子位置为

$$\frac{1}{2}(1, 1, 1) + (\bar{1}, 3, 3).$$

第 2 种典型原子位置为 $\frac{1}{2}(1, 1, 1) + (4, \bar{2}, \bar{2})$.

还可以一直作下去,本文仅作到六近邻为止. 这里一共有 9 种不等价的原子群,其中 7 种是 6 个原子的,我们把这种壳层称之为第 I 型壳层;另外 2 种是 12 个原子的位置的,我们称之为第 II 型壳层. 这两种壳层的原子轨道组成 D_{3d} 点群不可约表示的基函数方式不同.

要计算理想双空位的 E_g 和 E_u 态的波函数,我们要将各壳层的原子轨道按照这两种不可约表示的基函数重新组合. E_g 和 E_u 态都是两重简并的,因为实际双空位存在着 Jahn-Teller 畸变^[5-7],我们所关心的都是 E_g 态和 E_u 态中在 Jahn-Teller 畸变后能量较低的一个. 下面写出不可约表示的基函数,也是指的这个态. 我们分别对第 I 型壳层和第 II 型壳层讨论各原子轨道的对称化组合.

I 型壳层 我们把 I 型壳层的 6 个原子位置分别记为 AU, BU, CU 和 AD, BD, CD . 对最近邻壳层而言, AU, BU, CU 分别表示位于

$$\frac{1}{2}(1, 1, 1) + \{(\bar{1}, 1, 1), (1, \bar{1}, 1), (1, 1, \bar{1})\}$$

的 3 个原子位置, AD, BD, CD 则分别表示位于

$$\frac{1}{2}(\bar{1}, \bar{1}, \bar{1}) + \{(1, \bar{1}, \bar{1}), (\bar{1}, 1, \bar{1}), (\bar{1}, \bar{1}, 1)\}$$

的 3 个原子位置, 对于其它 I 型壳层, 原子位置可以类推得到. 将 1, 2, 3, 4 表示每个原子处的 4 个杂化轨道方向: $(1, \bar{1}, \bar{1}), (\bar{1}, 1, \bar{1}), (\bar{1}, \bar{1}, 1), (1, 1, 1)$ 或 $(\bar{1}, 1, 1), (1, \bar{1}, 1), (1, 1, \bar{1}), (\bar{1}, \bar{1}, \bar{1})$. 依在该个原子处, 杂化轨道应有的方向(上面两种可能性之一)而定. 然后用每个原子的位置标记 AU, 或 BD 等后面加一数字表示在该原子位置处的某一确定方向的杂化轨道, 例如对最近邻壳层 AU1 表示位于 $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{3}{2}$ 处的指向

$(1, \bar{1}, \bar{1})$ 的杂化轨道, BD2 表示位于 $\frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$ 处的指向 $(1, \bar{1}, 1)$ 的杂化轨道, 余类推. 在引进了上述记号的基础上, 可以得到由 I 型壳层 6 个原子位置的 24 个 sp^3 杂化轨道共可以构成 4 组 E_g 不可约表示的基函数和 4 组 E_u 不可约表示的基函数, 每组共有两个分量, 由于如前所述的原因, 我们只关心其中的一个分量相应的基函数为

$$\begin{aligned} |E_g, R, 1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{12}} [(2AU1 - BU2 - CU3) + (2AD1 - BD2 - CD3)], \\ |E_g, R, 2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{12}} [(2AU4 - BU4 - CU4) + (2AD4 - BD4 - CD4)], \\ |E_g, R, 3, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{24}} [(2AU2 + 2AU3 - BU1 - BU3 - CU2 - CU1) \\ &\quad + (2AD2 + 2AD3 - BD1 - BD3 - CD2 - CD1)], \\ |E_g, R, 4, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}} [(BU3 - CU1 + CU2 - BU1) + (BD3 - CD1 \\ &\quad + CD2 - BD1)]. \end{aligned} \quad (1)$$

将(1)式中等号右端方括弧里面两个小括弧之间的(+)号换成(-)号, 我们可以得到相应的 $|E_u, R, 1, 1\rangle, |E_u, R, 2, 1\rangle, |E_u, R, 3, 1\rangle$ 和 $|E_u, R, 4, 1\rangle$ 的表达式. 我们将计算硅中理想双空位 E_g 态和 E_u 态的波函数对于每个 I 型壳层的 E_g 和 E_u 对称化组合的展开系数. II 型壳层: 其 12 个原子位置分别记作 AU, BU, CU, FU, GU, HU 和 AD, BD, CD, FD, GD, HD. 其含意是, AU, BU, CU, FU, GU, HU 分别位于

$$\frac{1}{2} (1, 1, 1) + \{(\bar{2}, 2, 0), (0, \bar{2}, 2), (2, 0, \bar{2}), (\bar{2}, 0, 2), (2, \bar{2}, 0), (0, 2, \bar{2})\}$$

的原子位置, AD, BD, CD, FD, GD, HD 则位于与这些对于原点 $(0, 0, 0)$ 对称的原子位置, 对于另一 II 型壳层, 原子位置可以类推得到. 由 II 型壳层的 12 个原子位置 48 个 sp^3 杂化轨道, 可以组成 8 组 E_g 不可约表示的基函数和 8 组 E_u 不可约表示的基函数, 与前面 I 型壳层属于同一分量的基函数为

$$\begin{aligned} |E_g, R, 1, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{24}} [(2AU1 + 2FU1 - BU2 - CU3 - GU2 - HU3) \\ &\quad + (2AD1 + 2FD1 - BD2 - CD3 - GD2 - HD3)], \\ |E_g, R, 2, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{24}} [(2AU2 + 2FU3 - BU3 - CU1 - GU1 - HU2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (2AD2 + 2FD3 - BD3 - CD1 - GD1 - HD2)], \\
|E_g, R, 3, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{24}} [(2AU3 + 2FU2 - BU1 - CU2 - GU3 - HU1) \\
& + (2AD3 + 2FD2 - BD1 - CD2 - GD3 - HD1)], \\
|E_g, R, 4, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{24}} [(2AU4 + 2FU4 - BU4 - CU4 - GU4 - HU4) \\
& + (2AD4 + 2FD4 - BD4 - CD4 - GD4 - HD4)], \\
|E_g, R, 5, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}} [(BU2 - CU3 - GU2 + HU3) + (BD2 \\
& - CD3 - GD2 + HD3)], \\
|E_g, R, 6, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}} [(BU3 - CU1 - GU1 + HU2) + (BD3 \\
& - CD1 - GD1 + HD2)], \\
|E_g, R, 7, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}} [(BU1 - CU2 - GU3 + HU1) + (BD1 \\
& - CD2 - GD3 + HD1)], \\
|E_g, R, 8, 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{8}} [(BU4 - CU4 - GU4 + HU4) + (BD4 \\
& - CD4 - GD4 + HD4)]. \tag{2}
\end{aligned}$$

与前面 I 型壳层情况类似, 只需将前面式子中等号右端两个小括弧之间的 (+) 号换成 (-) 号, 就可以得到相应的 E_u 不可约表示的基函数. 我们计算双空位态的波函数, 就是对于从最近邻到六近邻的 7 个 I 型壳层和 2 个 II 型壳层, 分别算出相应的 $\langle E_g, R, n, 1|\phi\rangle$ 和 $\langle E_u, R, n, 1|\phi\rangle$.

二、理想双空位态的波函数的数值计算结果

表 1 和表 2 分别给出硅中理想双空位的 E_g 和 E_u 态的展开系数 $\langle E_g, R, n, 1|\phi\rangle$ 和 $\langle E_u, R, n, 1|\phi\rangle$ 在各原子壳层 R 的数值计算结果. 同时还给出了相应电子态处在该壳层 R 的几率, 它是相应展开系数的绝对值的平方和.

由此可以见到这两种理想双空位态电子波函数分布的一些一般特征:

1. 这两种电子态的波函数都集中在最靠近缺陷的几个原子壳层上, 特别是集中在缺陷最近邻 6 个原子的指向缺陷的 6 个悬挂键上 (相应的展开系数为 $\langle E_g, 1, 1, 1|\phi\rangle = 0.7578$ 和 $\langle E_u, 1, 1, 1|\phi\rangle = 0.7818$), 相应的几率分别为 E_g 态是约 57%, E_u 态为约 61%. 可以注意到, 这和 Si 中理想单空位 T_2 态电子波函数^[6]都集中在邻近缺陷的几个近邻原子层上, 特别是最近邻 4 个原子的指向缺陷处的 4 个悬挂键上 (几率约为 60%), 十分相似.

2. 两个态在各个壳层上占据的几率虽然一般而言是随着该壳层离原点的距离而递减的, 但并不是单调递减的, 还是有一些起伏, 理想单空位的波函数分布也存在着类似的现

象^[6].

3. E_g 态和 E_u 态的波函数分布总的看来是十分相似的, 但还有一些不同. 可以注意到实验测得的两个双空位态 V_1^+ 和 V_2^+ 的波函数是十分相似的, 但也有一些不同.

表 1 硅中理想双空位 E_g 态波函数

原子壳层	$\langle E_g, R, 1, 1 \phi \rangle$	$\langle E_g, R, 2, 1 \phi \rangle$	$\langle E_g, R, 3, 1 \phi \rangle$	$\langle E_g, R, 4, 1 \phi \rangle$	$\langle E_g, R, 5, 1 \phi \rangle$	$\langle E_g, R, 6, 1 \phi \rangle$	$\langle E_g, R, 7, 1 \phi \rangle$	$\langle E_g, R, 8, 1 \phi \rangle$	几率
最近邻	0.7578	-0.0108	-0.0342	-0.0116					0.5757
次近邻	0.1193	-0.2819	0.0501	0.1293	-0.0007	-0.0073	0.0325	0.0890	0.1220
三近邻-1	0.0811	-0.1788	0.0656	-0.0456					0.0453
三近邻-2	0.0021	-0.0259	0.0590	-0.0960					0.0134
四近邻	0.0038	0.0022	0.0577	-0.0679					0.0080
五近邻-1	0.0019	-0.0208	0.0148	0.0024					0.0007
五近邻-2	0.1691	-0.0267	-0.0285	-0.0236	0.0229	-0.0090	0.0217	0.0143	0.0320
六近邻-1	0.1041	-0.0112	-0.0291	-0.0071					0.0111
六近邻-2	0.0592	-0.0081	-0.0082	-0.0317					0.0046

表 2 硅中理想双空位 E_u 态波函数

原子壳层	$\langle E_u, R, 1, 1 \phi \rangle$	$\langle E_u, R, 2, 1 \phi \rangle$	$\langle E_u, R, 3, 1 \phi \rangle$	$\langle E_u, R, 4, 1 \phi \rangle$	$\langle E_u, R, 5, 1 \phi \rangle$	$\langle E_u, R, 6, 1 \phi \rangle$	$\langle E_u, R, 7, 1 \phi \rangle$	$\langle E_u, R, 8, 1 \phi \rangle$	几率
最近邻	0.7818	-0.0199	-0.0103	0.0831					0.6186
次近邻	0.1000	-0.2839	0.0822	0.0532	-0.0078	-0.0393	0.0382	-0.1191	0.1174
三近邻-1	0.0778	-0.2034	0.0792	-0.0310					0.0546
三近邻-2	0.0211	0.0064	0.0395	-0.0965					0.0114
四近邻	-0.0063	0.0034	0.0795	-0.0456					0.0084
五近邻-1	-0.0109	-0.0019	0.0211	-0.0190					0.0009
五近邻-2	0.1147	-0.0099	-0.0209	-0.0242	-0.0374	-0.0027	-0.0134	-0.0090	0.0159
六近邻-1	0.1031	-0.0102	-0.0240	0.0113					0.0114
六近邻-2	0.0113	0.0166	0.0031	0.0018					0.0004

三、讨 论

在实验上, 观测到 ESR 和 ENDOR 谱的硅中双空位态是 V_1^+ 和 $V_2^{+[-7]}$, 即双空位带有一个正电荷或负电荷的态, 这两个态都存在着 Jahn-Teller 畸变, 这时缺陷系统的点群对称性将进一步下降为 C_{2v} . 直接将我们的计算结果和实验测得的 ESR 和 ENDOR 谱进行一对一的比较是困难的, 但是我们从实验结果和计算数值之间的分析讨论中, 还是可以看出一些值得指出之处.

1. 实验结果确实证明了缺陷态的电子波函数是在最靠近缺陷的原子处^[5-7]. 但因 V_1^+ 和 V_2^+ 都存在着 Jahn-Teller 畸变, 因此文献 [6, 7] 将双空位附近的原子位置分为两类: M类和G类, M类相当于我们这里第 I 型壳层的 AU 和 AD 原子位置 (假定 Jahn-Teller 畸变对于 (0, 1, 1) 平面是对称的), 第 I 型壳层的其余 4 个原子构成一套文献 [6, 7] 中所说的 G 原子, 第 II 型壳层的 12 个原子构成三套 G 原子. 在文献 [5-7] 中, 给出了对

于缺陷的最近邻G原子和M原子,由 ESR 谱或 ENDOR 谱所决定的 η^2 , α^2 , β^2 , 这里 η^2 , α^2 , β^2 分别是缺陷态电子波函数在该原子上的几率,以及在该原子上的电子波函数的 S 部分的比例和 P 部分的比例. 由我们前面给出的电子波函数的计算值,也可以算出相应的 η^2 , α^2 , β^2 计算值,两者的比较如表 3 所示.

表 3 缺陷最近邻原子处实验值和计算值的比较

原子类型			M			G			文献
			α^2	β^2	$\eta^2(\%)$	α^2	β^2	$\eta^2(\%)$	
实验结果	ESR	V_2^-	0.17	0.83	27	(0.25)	(0.75)	3	[5]
		V_2^+	0.11	0.89	31	(0.25)	(0.75)	2	[5]
	ENDOR	V_2^-	0.170	0.830	27.11	0.256	0.744	2.97	[7]
		V_2^+	$\alpha^2\eta^2 = 3.56$			$\alpha^2\eta^2 = 0.46$			[6]
理论	E_g		0.212	0.788	19.18	0.212	0.788	4.81	本文
	E_u		0.228	0.772	20.14	0.221	0.779	5.27	

由表 3 我们看到计算值和实验值的一个最显著的区别似乎是由于 M 型原子, 实验测得的 η^2 比我们计算的要大得多, 但是给出此实验结果的文献[7]也同时指出, 如果将在全体原子上的 η^2 加起来, 应当得到 100% (归一化), 但该文给出的 132 个原子上的 η^2 之和已经达到了 119%. 所以看起来这里实验和理论不相符合的主要原因并非我们的计算结果太小, 而是“实验结果”太大了!

另一个差别是我们算得的在 G 型原子上的 η^2 或更直接的是 $\eta^2\alpha^2$ 比实验结果大, 因实际上 $\eta^2\alpha^2$ 是更直接测到的. 这是因为我们的计算中没有考虑到 Jahn-Teller 效应的原因. 就此, 我们可以作如下讨论:

对于最近邻壳层, 4 组 E_g 或 E_u 不可约表示的基函数除(1)式的写法外, 还可以将 S 部分和 P 部分分开来写, 这样, 我们会有以 E_g 态为例

$$|E_g, 1\rangle = \langle E_g, 1, S, 1|\phi\rangle \cdot \frac{1}{\sqrt{12}} [(2|AUS\rangle - |BUS\rangle - |CUS\rangle) + (2|ADS\rangle - |BDS\rangle - |CDS\rangle)] + \dots \quad (3)$$

这里为了突出讨论的重点, 我们没有将波函数的其余部分都写出来, 而是用“...”代表. 正因为(3)式, 在我们的计算中, E_g 态(或 E_u 态)的波函数在 M 型原子上的 S 部分的几率 $\alpha^2\eta^2$, 总是在 G 型原子上 4 倍, 这可以由表 3 的计算数据上看出. 类似地, 双空位有 A_{1g} 态(虽然它不在禁带中),

$$|A_{1g}\rangle = \langle A_{1g}, 1, S, 1|\phi\rangle \cdot \frac{1}{\sqrt{6}} [(|AUS\rangle + |BUS\rangle + |CUS\rangle) + (|ADS\rangle + |BDS\rangle + |CDS\rangle)] + \dots \quad (4)$$

下面我们将 $\langle E_g, 1, S, 1|\phi\rangle$, $\langle A_{1g}, 1, S, 1|\phi\rangle$ 分别用 γ , δ 代表. 在 Jahn-Teller 畸变下, 系统的点群对称性由 D_{3d} 变为 C_{2v} , 因而会发生在原来的 $|E_g, 1\rangle$ 态中混入一部分 $|A_g\rangle$ 态, 因而新的波函数为

$$\begin{aligned}
 |\phi\rangle &= C_E|E_g, 1\rangle + C_A|A_g\rangle \\
 &= \left(C_E\gamma \cdot \frac{2}{\sqrt{12}} + C_A\delta \cdot \frac{1}{\sqrt{6}} \right) (|AUS\rangle + |ADS\rangle) \\
 &\quad - \left(C_E\gamma \frac{1}{\sqrt{12}} - C_A\delta \frac{1}{\sqrt{6}} \right) (|BUS\rangle + |CUS\rangle + |BDS\rangle \\
 &\quad + |CDS\rangle) + \dots
 \end{aligned} \tag{5}$$

因此 Jahn-Teller 效应的效果是使得 M 原子上的 S 部分的几率 $\alpha^2\eta^2$ 与 G 原子上的相应几率之比变成

$$\left(\frac{\sqrt{2} + \frac{C_A}{C_E} \frac{\delta}{\gamma}}{\frac{1}{\sqrt{2}} - \frac{C_A}{C_E} \frac{\delta}{\gamma}} \right)^2$$

如果 $C_A\delta$ 和 $C_E\gamma$ 符号相同, 此式将大于 4, 这正是在实验中观测到的情况, 对 V_2^- 此式的实验值约为 6.2, 由此估计出 $\frac{C_A\delta}{C_E\gamma} \approx 0.10$, 因此估计出对于 V_2^- 由于 Jahn-Teller 畸变引起原来的 E 型波函数将混入约 1% 的原来 A_1 型的波函数。对于 V_2^+ , 因从实验上尚未确定是 G1 还是 G2 相应于最近邻原子^[7], 混入量尚难最后确定, 如果按文献[6]所说, 是 G2 型原子, 则混入量约为 2%, 如果是 G1 型原子, 则混入量在 1% 与 2% 之间。看来这个估计也许是合理的。

从上面的分析我们亦看到, Jahn-Teller 畸变所引起的波函数的少量混杂 ($\sim 1\%$), 即会引起 ENDOR 谱和 ESR 给出的实验结果与理想双空位计算值有较大的偏离, 因此我们不再打算将计算结果与实验结果对其它各壳层作一对一的比较, 但看起来作下面的一些估计也许并不过份: 我们的计算给出了一个物理上基本正确的硅中理想双空位态电子结构的图象, 从而给今后进一步考虑 Jahn-Teller 畸变下的双空位态的电子结构有了一个比较好的准备。我们的双空位态的电子波函数, 无论从其物理基础上还是从其计算结果上, 都显著地优于过去仅有的 EHT 理论的结果^[7,9]。

参 考 文 献

- [1] 任尚元、茅德强、李名复, 物理学报, **34**(1985), 455.
- [2] P. Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solids*, **44**(1983), 365.
- [3] D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **B8**(1983), 5747.
- [4] 茅德强、任尚元、李名复, 物理学报, **35**(1986), 808.
- [5] G. D. Watkins and J. W. Corbett, *Phys. Rev.*, **138**(1965), A543.
- [6] J. G. de Wit, E. G. Sieverts and C. A. J. Ammerlaan, *Phys. Rev.*, **B14**(1976), 3494.
- [7] E. G. Sieverts, S. H. Muller and C. A. J. Ammerlaan, *Phys. Rev.*, **B18**(1978), 6874.
- [8] 李名复、任尚元、茅德强, 物理学报, **32**(1983), 1263.
- [9] C. A. J. Ammerlaan and J. C. Wolfrat, *Phys. Stat. Sol.*, **b89** (1978), 85.
- C. Weigel and C. A. J. Ammerlaan, *Phys. Stat. Sol.*, **b94**(1979), 505.

ELECTRONIC STRUCTURE OF THE DIVACANCY IN CUBIC SEMICONDUCTORS (III)

WAVEFUNCTIONS OF THE DIVACANCY STATES IN SI

REN SHANG-YUAN MAO DE-QIANG

(Department of Physics, University of Science and Technology of China, Hefei)

LI MING-FU

(Graduate School, University of Science and Technology of China, Beijing)

ABSTRACT

The wavefunctions of the E_u state and the E_g state are evaluated for the ideal divacancy in Si, using the basic equations given in [1] and the tight binding Hamiltonian given by P. Vogl et al. Comparison between the calculated results and the ESR and ENDOR spectra of V_2^+ and V_2^- in Si is discussed.