

Si 中 S^0/Se^0 , S^0/Te^0 和 Se^0/Te^0 对的电子结构*

顾 一 鸣 任 尚 元

(中国科学院大学物理系)

1986 年 4 月 14 日收到

提 要

利用紧束缚近似下的格林函数方法,讨论了 Si 中硫属元素混对杂质(即 S^0/Se^0 , S^0/Te^0 和 Se^0/Te^0) 基态的电子结构. 混对杂质在 Si 禁带中引入两个 A_1 能级,其中成键性的 A_1 能级位置在反键性的 A_1 能级之上. 数值计算得到的混对杂质能级与实验符合得相当好. 理论分析表明,在 Si 中测到的那些未定的比最近邻混对杂质能级更浅的能级

$$(S^0/Se^0(X_1), S^0/Te^0(X_1), Se^0/Te^0(X_1)\dots)$$

不是由非最近邻位型的混对杂质引入的. 本文还指出了一个极性分子放入 Si 晶体中,两个不同原子间 s 波函数的转移方向与通常极性分子相反,并讨论其物理原因.

一、引 言

近二十多年来,人们对最重要的半导体材料 Si 中的 VI 族硫属元素 S, Se, Te 的行为进行了大量的研究. 纵观所有的研究工作,可以说,实验工作已经达到一定的深度. 在某些方面,人们对它们的了解甚至比对 III, V 族杂质更深、更完全^[1]. 目前的实验工作已经涉及到单个点缺陷、缺陷对(缺陷对包括两种,一种是纯对 (pure pairs), 另一种是混对 (mixed pairs), 分别指相同和不同硫属元素构成的缺陷对)、甚至缺陷团^[1,2]. 相对而言,理论工作比较缺乏,还没有一个被大家普遍接受的令人信服的理论来说明众多的实验事实. 但是值得注意的是近年来发展起来的在位势近似 Koster-Slater 格林函数方法在计算杂质的多种性质方面获得成功^[3-6],其中包括对点缺陷硫属元素的讨论^[7]. 最近, Sankey 等人^[8]和胡伟敏等人^[9]用同样的方法从不同的角度讨论了 Si 中纯对杂质,即 $(S^0)_2$, $(Se^0)_2$ 和 $(Te^0)_2$ 的电子结构,尽管考虑问题的角度不同,但他们都意识到: 在 D_{3d} 对称性下, Si 中纯对杂质引入的对称的 A_{1g} 成键能级位置应该高于反对称的 A_{2u} 反键能级, 实验测到的应该是 A_{1g} 能级. 这一结论与通常“缺陷分子”模型完全相反. 文献 [9] 还讨论了导致这一结果的物理原因.

关于 Si 中混对杂质(即 S^0/Se^0 , S^0/Te^0 和 Se^0/Te^0) 的研究是近几年的事情. Sankey

* 中国科学院科学基金资助的课题.

等人^[8]在 1984 年给出了混对杂质在 Si 中可能的深能级位置的理论预言. 同年, Wagner 等人^[1]也发表了关于 Si 中混对杂质的实验结果. 但是, 理论预言和实验结果存在一定的差别, 尤其是理论预言 S^0/Te^0 引入的基态深能级比 Se^0/Te^0 引入的要浅一些, 但实验事实与此相反. 由此看来, 对 Wagner 等人的实验结果给以一个在数值上及能级顺序上一致的理论说明是需要的. Wagner 等人用红外吸收方法测量了混对杂质基态深能级值, 但他们无法断定混对杂质的位形(最近邻还是次近邻等). 一个基于一定模型的与实验符合的理论说明有助于回答这个问题. 另外, Wagner 等人在实验中还测到了较浅的基态深能级值. 他们认为可能是不同位形的混对杂质引入的. 这种看法的正确与否也需要从理论上给以判断.

S, Se 和 Te 在 Si 中被普遍认为是代位型杂质^[1]. 纯对杂质在 Si 中具有 D_{3d} 对称性, 混对杂质对称性降为 C_{3v} . 在 D_{3d} 对称性时, 构成最近邻纯对杂质的两个原子的原 T_d 群的 A_1 能级形成新的 D_{3d} 群的 A_{1g} 和 A_{2u} 能级, 其中对称性的 A_{1g} 态反而高于反对称性的 A_{2u} 态. 那么, 一旦对称性降为 C_{3v} , 即最近邻混对杂质情形, 此时两个原子的原 T_d 群的 A_1 态将如何变化? 是否还应该有成键态反而在反键态之上的结论? 在不同杂质原子构成极性键的情况下, 缺陷位的波函数将如何变化? 与两个不同的孤立原子构成的极性键有些什么不同? 这些问题以及 Wagner 等人的实验结果都需要人们给以明确的回答与说明.

本文用紧束缚近似下的格林函数方法, 讨论了 Si 中 S^0/Se^0 , S^0/Te^0 和 Se^0/Te^0 混对杂质的电子结构, 试图说明 Wagner 等人的实验结果和回答以上存在的问题.

二、理论公式

本文采用两个基本假定^[3], 即完整晶体 Si 的能带用 Vogl 等人^[10]的紧束缚哈密顿量来描述, 缺陷引起的微扰作用在位势近似.

首先, 我们假定混对杂质是在最近邻位置上, 不失一般性, 设两个杂质原子的连线在 $\langle 111 \rangle$ 方向, 坐标原点选在连线的中点. 这样, 二缺陷的坐标分别是 d 和 d' , 即 $\frac{a}{8}(\bar{1}, \bar{1}, \bar{1})$ 和 $\frac{a}{8}(1, 1, 1)$.

混对杂质在 Si 禁带中引入的电子态满足方程

$$|\phi\rangle = GH_1|\phi\rangle. \quad (1)$$

这里 G 是完整晶体的格林函数算符, H_1 是由于缺陷引入的微扰势. 在位势近似下的 C_{3v} 情况, 可把 H_1 和 (1) 式按照 C_{3v} 群的不可约表示写出, 因而在缺陷空间里

$$\begin{aligned} H_1 = & |A_1, d, 1\rangle V_s^d \langle A_1, d, 1| + |A_1, d, 2\rangle V_p^d \langle A_1, d, 2| \\ & + \sum_{i=1}^2 |E, d, i\rangle V_p^d \langle E, d, i| + |A_1, d', 1\rangle V_s^{d'} \langle A_1, d', 1| \\ & + |A_1, d', 2\rangle V_p^{d'} \langle A_1, d', 2| + \sum_{i=1}^2 |E, d', i\rangle V_p^{d'} \langle E, d', i|. \quad (2) \end{aligned}$$

这里 $|A_1, d, 1\rangle$ 等波函数的意义与文献 [11] 相同, V_s^d , V_p^d 和 $V_s^{d'}$, $V_p^{d'}$ 分别是 d 和 d' 两

个原子的在位势参量. 对 A_1 态方程 (1) 变为

$$\begin{aligned} \langle A_1, \mathbf{R}, n | \phi \rangle = & \langle A_1, \mathbf{R}, n | G | A_1, d, 1 \rangle V_s^d \langle A_1, d, 1 | \phi \rangle \\ & + \langle A_1, \mathbf{R}, n | G | A_1, d, 2 \rangle V_p^d \langle A_1, d, 2 | \phi \rangle \\ & + \langle A_1, \mathbf{R}, n | G | A_1, d', 1 \rangle V_s^{d'} \langle A_1, d', 1 | \phi \rangle \\ & + \langle A_1, \mathbf{R}, n | G | A_1, d', 2 \rangle V_p^{d'} \langle A_1, d', 2 | \phi \rangle, \end{aligned} \quad (3)$$

式中 \mathbf{R} 取 d, d', n 取 1, 2, 则变换为关于变量 $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ 的四元一次方程组, 其中

$$\begin{aligned} \alpha = & \langle A_1, d, 1 | \phi \rangle, \quad \beta = \langle A_1, d, 2 | \phi \rangle, \\ \gamma = & \langle A_1, d', 1 | \phi \rangle, \quad \delta = \langle A_1, d', 2 | \phi \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

这个线性方程组有解的条件是

$$\begin{vmatrix} 1 - V_s^d \langle A_1, d, 1 | G | A_1, d, 1 \rangle & 0 & -V_s^{d'} \langle A_1, d, 1 | G | A_1, d', 1 \rangle \\ 0 & 1 - V_p^d \langle A_1, d, 2 | G | A_1, d, 2 \rangle & -V_s^{d'} \langle A_1, d, 2 | G | A_1, d', 1 \rangle \\ -V_s^d \langle A_1, d', 1 | G | A_1, d, 1 \rangle & -V_p^d \langle A_1, d', 1 | G | A_1, d, 2 \rangle & 1 - V_s^{d'} \langle A_1, d', 1 | G | A_1, d', 1 \rangle \\ -V_s^d \langle A_1, d', 2 | G | A_1, d, 1 \rangle & -V_p^d \langle A_1, d', 2 | G | A_1, d, 2 \rangle & 0 \\ & -V_p^{d'} \langle A_1, d, 1 | G | A_1, d', 2 \rangle \\ & -V_p^{d'} \langle A_1, d, 2 | G | A_1, d', 2 \rangle \\ & 0 \\ & 1 - V_p^{d'} \langle A_1, d', 2 | G | A_1, d', 2 \rangle \end{vmatrix} = 0, \quad (5)$$

如 V_s^d, V_p^d 和 $V_s^{d'}, V_p^{d'}$ 已知, 则由 (5) 式可定出 A_1 态的能量. 注意到 $V_s^d = V_s^{d'}, V_p^d = V_p^{d'}$ 时, 即由混对变为纯对杂质时, C_{3v} 的 H_1 将转化为 D_{3d} 的 H_1 , (5) 式与 D_{3d} 情况下决定 A_{1g} 和 A_{2u} 态能量的两个 2×2 的行列式等价^[9].

定在位势参量的方法与文献 [9] 相同, 即用单个 S^0, Se^0, Te^0 的能级实验值定出 V_s , 然后由 $(S^0)_2, (Se^0)_2, (Te^0)_2$ 等纯对的 A_{1g} 态能级实验值定出 V_p , 具体的数值列在表 1 中. 值得一提的是, 用这些参量若能算出与混对能级实验值相吻合的结果, 则实际上也给出了文献 [9] 关于能级位置看法的一个佐证.

表 1 Si 中 S^0, Se^0, Te^0 的在位势参量(单位: eV)

	S^0	Se^0	Te^0
V_s	-5.283	-5.023	-4.421
V_p	0.031	-0.283	-0.675

本文还计算了混对杂质缺陷位波函数. 对于缺陷位, (3) 式给出了四个方程, 但由于存在 (5) 式, 故四个方程中仅有三个是独立的. 我们可以从归一化条件得到另外一个方程, 即

$$\sum_{\mathbf{R}, n} (\langle A_1, \mathbf{R}, n | \phi \rangle)^2 = 1, \quad (6)$$

这样便给出了定波函数的完整方程.

三、计算结果和讨论

图 1 是由 (5) 式得到的, 纵坐标是行列式值, 横坐标是能量, 能量的零点选在 Si 的价

带顶. 为了便于比较,图 1 中画出了 $(S^0)_2$ (虚线)及 S^0/Te^0 (实线)两条典型曲线.从图 1

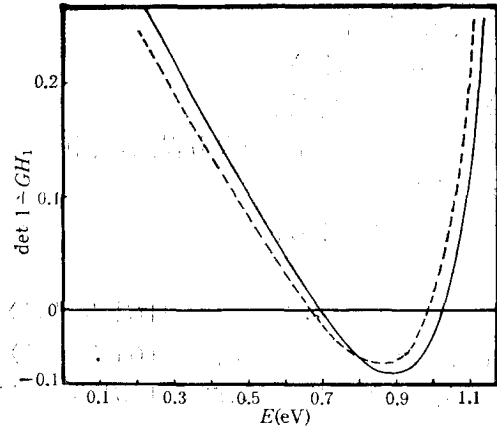


图 1

我们可以看到当 $(S^0)_2$ 中一个原子被 Te^0 原子替换以后,曲线有一个移动,这个移动的大小取决于替换原子与另一个 S^0 原子原子势的差别,差别越大,移动越大,反之就小.对于硫属元素而言,原子势的差别并不大,曲线移动都不会大于图 1 中的情况.另外,在禁带中每条曲线与横坐标有两个交点.对 $(S^0)_2$ 而言,能量较小的交点即是 A_{2u} 能级的位置,而能量较大的交点是 A_{1g} 能级的位置,这一点的物理原因文献 [9] 已阐明.对 S^0/Te^0 情况将如何呢? 我们知道,在 S^0 和 Te^0 分别构成孤立的点缺陷时,分别

会在禁带中引入一个 A_1 能级和在导带中引入一个三重简并的 T_2 能级^[9], S^0 和 Te^0 的两个 A_1 能级对应于实验测到的导带下面 0.188 eV 和 0.199 eV 的两个能级.一旦 S^0 和 Te^0 靠拢构成最近邻混对缺陷时,则晶体的对称性变为 C_{3v} , 原禁带中的两个 A_1 态就会发生重新组合.由于 S^0 和 Te^0 的缺陷势不同,缺陷位的波函数将发生变化,但这种变化与两个不同的孤立原子构成极性键时波函数的变化是不同的,这一点我们在讨论缺陷位波函数时再来详细说明.计算还表明,与孤立的极性分子成键的情况相反,具有成键性质的 A_1 态能级反而在具有反键性质的 A_1 态能级之上.考虑到导带与价带不同对称性态密度对禁带能级的作用^[9],这个结果是容易理解的.这样,混对杂质的 $2 \times 6 = 12$ 个价电子,除了像 Si 原子一样,每个杂质原子有 4 个电子与最近邻原子成键以外,还要多出 $2 \times 2 = 4$ 个电子,两个填充在反键性的 A_1 能级,两个填充在成键性 A_1 能级上,而实验上测到的是成键性的 A_1 能级.以上的讨论可由图 2 清楚表明.

基于对能级对称性的正确考虑之上,我们将所有的 S^0/Se^0 , S^0/Te^0 , Se^0/Te^0 的 A_1 成键性和 A_1 反键性能级的计算值及 Wagner 等人的实验值列在表 2 中.从表 2 的数据可以看到,计算值与实验值符合得相当好,并且能级的顺序也完全一致.因此,计算结果使我们相信, Wagner 等人的这些实验数据是对最近邻的混对杂质测到的,并且测到的能级是 C_{3v} 情况下的 A_1 成键性能级.

相对 V_s 而言,硫属元素 S^0 , Se^0 , Te^0 的在位势参数 V_p 均较小,如果忽略它们的影响,则 (5) 式简化为

$$(1 - V_s^d G_{ss}(E))(1 - V_s^{d'} G_{s's'}(E)) = V_s^d V_s^{d'} G_{s's'}(E), \quad (7)$$

其中 $G_{ss}(E) = \langle A_1, d, 1 | G | A_1, d, 1 \rangle$, $G_{s's'}(E) = \langle A_1, d', 1 | G | A_1, d', 1 \rangle$, $G_{s's'}(E) = \langle A_1,$

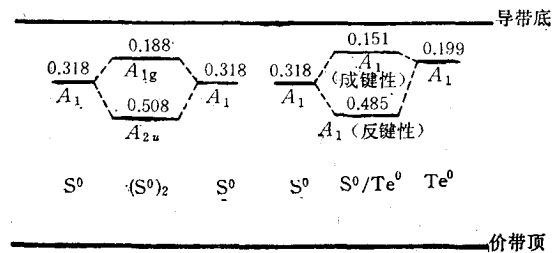


图 2

表 2 (单位: eV)

实 验 值		计 算 值		
	$1s(A_1?)$		A_1 (成键性)	A_1 (反键性)
$S^0/Se^0(Y)$	191.9	S^0/Se^0	186.4	671.8
$S^0/Te^0(Y)$	156.2	S^0/Te^0	150.8	689.4
$Se^0/Te^0(Y)$	170.8	Se^0/Te^0	163.2	710.0

$d, 1|G|A_1, d', 1\rangle$. 图 3 由 (7) 式画出, 曲线 1 和 2 分别对应于 (7) 式等号左边和右边的式子, 能量零点选择在价带顶. 曲线 1 与横坐标的两个交点分别对应于 S^0 和 Te^0 点缺陷的 A_1 能级 (分别为 0.856 和 0.975 eV). 曲线 1 和 2 两个交点对应的横坐标值就是最近邻混对缺陷的两个能级, 其中 A_1 (成键性) = 1.03 eV, A_1 (反键性) = 0.73 eV, 与 (5) 式的计算值相比, 误差小于 0.04 eV. 另外, 当 V_i^d 和 V_j^d 一定, 即杂质原子一定的情况下, $G_{ij}'(E)$ 的大小决定图 3 中曲线 2 的高低. $G_{ij}'(E)$ 变大, 曲线 2 就升高, 与曲线 1 的两个交点的横坐标值就分别向导带底和价带顶靠近, 即成键性和反键性 A_1 态分别向导带底和价带顶靠近. 若 $G_{ij}'(E)$ 变小, 则以上过程相反, 一旦 $G_{ij}'(E)$ 等于零, 就是两个孤立点缺陷的情形. 注意到 $G_{ij}'(E)$ 的大小取决于两个缺陷原子 s 态电子耦合的强弱, 在最近邻的情况下, $G_{ij}'(E)$ 已取最大值, 故其它非最近邻位形的混对杂质引入的成键性能级要低于最近邻情形, 而反键性能级则要高. 因为实验上测到的电子填充的最高能级是成键性能级, 所以我们认为 Wagner 等人测到的那些离导带底更近的深能级不可能由其它位形的混对缺陷产生, 很有可能是由三个原子以上的复杂缺陷所产生的. 总之, 硫属元素杂质对在 Si 引入的深能级, 其实验值将在二杂质原子分别为点缺陷时离导带底近的那个 A_1 能级与构成最近邻时引入的成键性 A_1 能级 (或 A_{1g} 能级) 之间. 这与 GaP 中的 NN 对不同, 在那里 NN 对引入的深能级总是低于单 N 的能级^[12].

表 3 给出了缺陷位波函数的计算值. 为了便于比较, 表 3 中还给出了纯对杂质缺陷位波函数值. 从表 3 可见, A_{2u} 态 (或 A_1 反键性态) 的波函数比 A_{1g} 态 (或 A_1 成键性态) 数值要大, 特别是 s 态的波函数成份更大, 这一点与文献 [8] 的结论一致. 对纯对杂质, A_{1g} 态波函数在两个缺陷位上符号相同, 大小一样; 对混对杂质, 符号相同但大小不同. 这恰好说明它们都是成键态, 前者是共价键而后者是极性键. A_{2u} 态波函数在两个缺陷位上符号相反但大小一样, A_1 反键性态波函数符号相反且大小也不一样, 这恰好说明它们都是反键性态, 前者是共价键而后者是极性键.

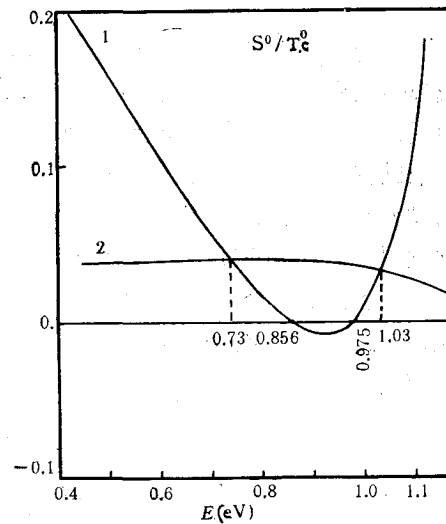


图 3

表 3

表示 杂质	A_{1g} (或 A_1 (成键性))					A_{2u} (或 A_1 (反键性))				
	$\langle A_{1g}, d, 1 \phi \rangle$	$\langle A_{1g}, d, 2 \phi \rangle$	$\langle A_{1g}, d', 1 \phi \rangle$	$\langle A_{1g}, d', 2 \phi \rangle$	几率(%)	$\langle A_{1g}, d, 1 \phi \rangle$	$\langle A_{1g}, d, 2 \phi \rangle$	$\langle A_{1g}, d', 1 \phi \rangle$	$\langle A_{1g}, d', 2 \phi \rangle$	几率(%)
$(S^0)_2$	0.209	-0.208	0.209	-0.208	17.40	0.313	0.228	-0.313	-0.228	29.90
$(Se^0)_2$	0.213	-0.195	0.213	-0.195	16.68	0.315	0.242	-0.315	-0.242	31.50
$(Te^0)_2$	0.218	-0.174	0.218	-0.174	15.60	0.322	0.260	-0.322	-0.260	34.17
S^0/Se^0	0.177	-0.216	0.243	-0.183	17.05	0.335	0.220	-0.291	-0.247	30.63
S^0/Te^0	0.115	-0.237	0.295	-0.130	17.33	0.364	0.194	-0.243	-0.275	30.48
Se^0/Te^0	0.147	-0.222	0.276	-0.138	16.61	0.355	0.215	-0.270	-0.276	32.13

众所周知,两个不同的孤立原子构成极性键分子时,二原子间会发生波函数转移,对成键性态波函数将从电负性较弱的原子转移到电负性较强的原子;对反键性态,这种过程相反.但是一旦把这样一个分子放入 Si 晶体中,是否仍然有上述过程呢?这个问题至今还未见有人讨论过.以表 3 中的 S^0/Te^0 为例,我们看到,成键性态 s 波函数将从电负性强的 S^0 流向电负性弱的 Te^0 ,而反键性态 s 波函数却从电负性弱的 Te^0 流向电负性强的 S^0 ,这过程与孤立极性分子的情况完全相反.引起这种变化的原因到底是什么?

为了说明这个问题,我们采用与 (7) 式同样的近似来讨论 S^0/Te^0 缺陷位波函数的变化情况.在略去 V_p 影响的前提下,从 (3)、(7) 二式略加推导,就可得到在深能级上有如下等式:

$$\frac{\langle s^d | \phi \rangle}{\langle s^{d'} | \phi \rangle} = \frac{G_{ss'}(E)V_s^{d'}}{1 - G_{ss}(E)V_s^d} = \frac{1 - G_{s's'}(E)V_s^d}{G_{s's}(E)V_s^d}, \quad (8)$$

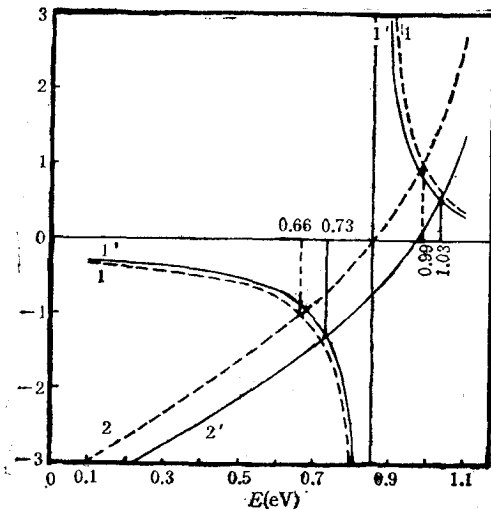


图 4

(8) 式左边是 d 位 S^0 的 s 态缺陷波函数与 d' 位 Te^0 的 s 态缺陷波函数之比.我们用图 4 来讨论 (8) 式.图 4 中曲线 1(1') 和 2(2') 分别由 (8) 式中间和右边的式子画出,用实线画出的曲线 1', 2' 和用虚线画出的曲线 1, 2 分别对应于 S^0/Te^0 和 $(S^0)_2$ 情形.先看 $(S^0)_2$ 情形,图 4 中曲线 1 以过横坐标 0.856 eV (即单 S^0 引入的 A_1 能级) 的垂线为其渐近线;曲线 1 和 2 的交点横坐标分别是 0.67 和 0.99 eV, 对应于 $(S^0)_2$ 的 A_{2u} 和 A_{1g} 两个能级;二曲线交点的纵坐标分别是 -1 和 1, 恰好说明 A_{2u} 和 A_{1g} 分别是反键态和成键态,并且两个缺陷位波函数的大小是一样的.再看 S^0/Te^0 情形,曲线 1' 具有与曲线 1 相同的渐近线;曲线 1' 和曲线 2' 交点的横坐标是 0.73 和 1.03 eV, 分别对应于 A_1 (反键性) 和 A_1 (成键性) 两个能级;两个交点的纵坐标由原 $(S^0)_2$ 的 +1 和 -1 变为 -1.30 和 0.54, 这说明 A_1 反键性态上波函数由 Te^0 流向 S^0 而成键性态上由 S^0 流向 Te^0 . 图 4 还告诉我们,当由 $(S^0)_2$ 过渡

到 S^0/Te^0 时, 曲线 1' 的变化不大, 这说明曲线 1' 主要是由 Si 的主体能带决定的; 而曲线 2 随 V_d^s 换为 $V_d^{s'}$ 的变化是明显的, 曲线 2 平移为曲线 2', 平移量取决于 V_d^s 和 $V_d^{s'}$ 的相对变化量; 曲线 2' 随能量变化趋势与曲线 2 相同, 因为这是由相同的主体格林函数决定的. 由上讨论并注意到曲线 1' 和曲线 2' 的共同交点决定 S^0/Te^0 缺陷位波函数的变化, 可以得到如下结论: 由于主体能带的影响(通过主体格林函数决定曲线 1' 和曲线 2' 随能量的变化趋势而体现出来), Si 中构成极性缺陷分子的两个原子之间 s 态波函数流动的方向与孤立极性分子的情况相反, 而流动的大小则由两个缺陷原子的原子势差决定. (原子势差决定曲线 2 的平移量, 平移量大, 波函数流动大, 反之则小.) 这里的讨论是在略去 V_p 的影响得到的. 不难论证, 计入 V_p 不会影响这里得出的基本结论.

最后顺便提一下, 如能用 $(S^0/Se^0)^+$, $(S^0/Te^0)^+$ 和 $(Se^0/Te^0)^+$ 的 ESR 或 ENDOR 实验证实这里指出的混对杂质缺陷态中 s 态波函数在两个不同原子上的差异, 将是十分有趣的, 看来最理想的实验对象是 $(S^0/Te^0)^+$.

参 考 文 献

- [1] P. Wagner, C. Holm, E. Sortl, R. Oeder and W. Zulchner, *Festkörperprobleme*, **XXIV** (1984), 191.
- [2] E. Janzén, R. Stedman, G. Grossmann and H. G. Grimmeiss, *Phys. Rev.*, **B26**(1982), 951.
- [3] H. P. Hjalmarson *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **44**(1980), 810.
- [4] S. Y. Ren, *Scientia Sinica*, **XXVII** (1984), 433.
- [5] 李名复、任尚元、茅德强, *物理学报*, **32**(1983), 1263.
- [6] M. F. Li, D. Q. Mao and S. Y. Ren, *Solid State Comm.*, **48**(1983), 798.
- [7] S. Y. Ren, W. M. Hu, O. F. Sankey and J. D. Dow, *Phys. Rev.*, **B26**(1982), 951.
- [8] O. F. Sankey and J. D. Dow, *Solid State Comm.*, **51**(1984), 705.
- [9] 胡伟敏、顾一鸣、任尚元, *物理学报*, **35**(1986), 1582.
- [10] P. Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solids.*, **44**(1983), 365.
- [11] 茅德强、李名复、任尚元, *物理学报*, **33**(1984), 897.
- [12] D. G. Thomas and J. J. Hopfield, *Phys. Rev.*, **150** (1966), 680.

ELECTRONIC STRUCTURES OF THE MIXED CHALCOGENIDE PAIRS IN Si

GU YI-MING REN SHANG-YUAN

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

ABSTRACT

Using the Green's function method with a tight binding Hamiltonian, the electronic structures of the ground states of S^0/Se^0 , S^0/Te^0 and Se^0/Te^0 mixed pairs in Si are investigated. Two A_1 symmetrical states are introduced by the mixed pairs, the bonding A_1 state is higher than the antibonding A_1 state. The numerical results of the energy levels of mixed pairs are obtained, which are in agreement with the experimental observations. It looks likely that the unidentified shallower energy levels (S^0/Se^0 (X_1), S^0/Te^0 (X_1), Se^0/Te^0 (X_1)...) are not introduced by the mixed pairs with other non-nearest positions. We note that the transfer direction of the s wavefunction between two different defect atoms in Si is reversed as compare with the ordinary diatomic molecule case. The physical reason is discussed.