

硅中 Jahn-Teller 畸变的双空位超 精细相互作用的理论计算

范希庆 申三国 张德萱

(郑州大学物理系)

1988年8月26日收到

采用扩展的 Koster-Slater 模型, 分别对硅中双空位的两种重要的 Jahn-Teller 畸变模, 计算了缺陷电荷态 V_i^+ , V_i^- 中未配对电子的超精细相互作用常数 a 和 b , 给出与实验符合得很好的结果. 由此还定出与实验相符合的能级和对称态: V_i^+ 的未配对电子处于能级约为 0.3 eV 的 A_g 对称态; 而 V_i^- 的电子处于能级约为 0.63 eV 的 B_u 态; EG1 模可能是 V_i^+ 和 V_i^- 的最优选的畸变.

一、引 言

硅中双空位的研究, 自 1965 年 Watkins 和 Corbett^[1] 的双空位的 EPR 实验开始, 到近期 De Wit 等人^[2] 和 Sieverts 等人^[3] 的 ENDOR 实验, 已提供较多的硅中双空位缺陷电子结构的信息. 这些实验资料表明, 双空位在禁带中引入深能级, 其位置与基体的费密能级的高低有关; 在 P 型 Si 中, 缺陷电子态可以是带正电荷的态 (V_i^+); 在 n 型 Si 中, 它可以是带负电荷的态 (V_i^-). 相应于 V_i^+ 和 V_i^- , 晶体都存在着 Jahn-Teller 畸变. 为解释这些实验结果, 已有一系列的理论工作, 其中包括 Lee 和 McGill^[4] 以及 Ammerlann 和 Wolfrat^[5] 的扩展的 Hückel 的理论 (EHT); Humphreys 等人^[6] 的自洽势计算; Fazzo 等人^[7] 的多重散射 X_α 的分子集团模型的研究; Pantelides 等人^[8] 的简单悬挂键模型的描述. 这些理论计算的结果都未能达到同 EPR 和 ENDOR 实验测得的超精细相互作用常数进行有意义比较的地步. 这就是说, 这些理论还都不能对缺陷态电子波函数给以可靠性的描述. 另外, 对 V_i^+ 和 V_i^- 所属的对称态也不能从理论上加以确定. 近来, 任尚元等人^[9,10] 用一个经验的 TB 格林函数方法对理想双空位的研究, 说明了硅中双空位电子波函数的一般性质, 并同 EPR 和 ENDOR 的波函数进行了大致的比较. 但由于他们采取中心在位势近似, 不考虑 Jahn-Teller 效应, 所以他们的结果同实验进行详细比较也是不可能的. 尽管如此, 他们的工作不论从物理基础上或是计算结果上来看, 都是很有启发性的. 本文在此基础上, 将贾勇强和秦国刚^[10] 对硅中 Jahn-Teller 畸变的单空位的讨论方法加以推广, 应用到硅中 Jahn-Teller 畸变的双空位.

缺陷态的超精细相互作用是由于未配对的电子磁矩同缺陷附近的原子核磁矩的耦合引起的. 因此, 要计算超精细相互作用常数, 必须计算缺陷态未配对电子波函数. 为此目

的, 首先对体系的对称性给以描述。为了包括 Jahn-Teller 效应, 采用扩展的 Koster-Slater 模型^[11]计算对称化波函数; 进而用算得的波函数计算超精细相互作用常数, 并同实验比较。最后对结果进行分析和讨论。

二、对 称 性

EPR 和 ENDOR 实验给出超精细相互作用常数都是属于缺陷周围的具有相同对称性的原子的。所以, 在计算缺陷波函数之前, 必须先确定体系的对称性。为了便于同实验进行比较, 采用文献[1—3]中的坐标系, 即取 x, y, z 为晶体的主轴方向。在 $[\bar{1}11]$ 方向移去原点 a' 上的和相邻格点 a 上的两个硅原子, 形成双空位, 体系具有 D_{3d} 点群对称性。如图 1。

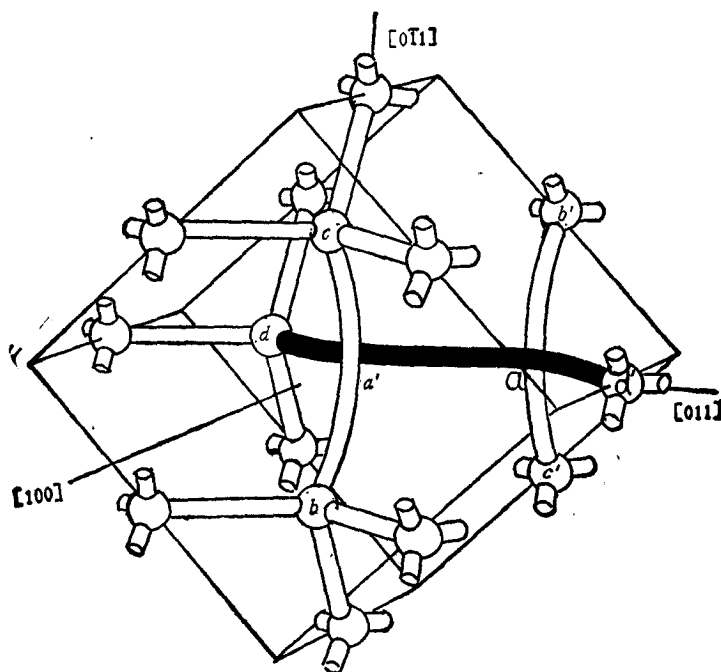


图1 ad 取向的双空位模型

由于 Jahn-Teller 畸变, 体系由 D_{3d} 对称降低为 C_{2v} 对称, 其群元用国际符号表示, 令晶格常数为 a_0 , 它们是: 恒等操作 $\{E|0\}$, 反射操作 $\{\sigma_{d(011)}|0\}$, 反演操作 $\left\{i \left| \frac{a_0}{4} (\bar{1}11) \right. \right\}$ 和二重旋转操作 $\left\{i\sigma_{d(011)} \left| \frac{a_0}{4} (\bar{1}11) \right. \right\}$ 。以缺陷为中心, 将格点原子按壳层 R 来划分。例如, 双空位上的原子组成 $R=0$ 壳层, 6 个最近邻格点上的原子组成 $R=1$ 壳层, 余类推。在 C_{2v} 的群元操作下, 按照格点上的原子能否互换, 每个壳层又区别为二个类壳层: 在镜面上的原子称为镜面类壳层, 如 $R=1$ 壳层的 d, d' 两个原子构成的镜面类, 记作 M_1 ; 不在镜面上的原子称为一般类壳层, 如 $R=1$ 的 b, c 和 b', c' 原子构成的

一般类壳层,记作 G_i , 等等.

硅中的双空位缺陷具有短程势 V . 当双空位的周围晶格不存在 Jahn-Teller 畸变时,短程势具有 D_{3d} 对称性,用 V_0 表示;发生 Jahn-Teller 畸变后,又引入一个小的微扰 ΔV , 具有 C_{2h} 对称性. 于是,缺陷势

$$V = V_0 + \Delta V \quad (1)$$

具有 C_{2h} 对称性. 从而单电子有效哈密顿量 $H = H_0 + V$ 也具有 C_{2h} 对称性. 因此,缺陷态波函数按 C_{2h} 的不可约表示变换. 把 ΔV 当作微扰,尽管不知 ΔV 的大小,但将理想双空位(畸变前)的波函数按 C_{2h} 的不可约表示来构成,可得到微扰后(畸变后)的零级波函数.

为获得缺陷的零级对称波函数的表达式,用各壳层原子的 sp^3 杂化轨道构成 C_{2h} 群的不可约表示的基函数. 按照图 1, 空位原子 a' 的坐标为 $(0, 0, 0)$, 4 个杂化轨道方向为 $(\bar{1}\bar{1}1)$, $(1\bar{1}\bar{1})$, $(11\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, 分别记作 AU_1, AU_2, AU_3, AU_4 ; 空位原子 a 的坐标为 $\frac{a_0}{4}(\bar{1}\bar{1}1)$, 4 个杂化轨道的方向为 $(1\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}\bar{1})$, $(\bar{1}\bar{1}1)$, (111) , 分别记作 AD_1, AD_2, AD_3, AD_4 . 对 $R \neq 0$ 壳层原子的坐标及其杂化轨道的方向,也作同样的处理. 然后,用投影算符法,不难分壳层构成 C_{2h} 群的不可约表示的基函数 $|lRm\rangle$, 其中 l 代表 C_{2h} 的不可约表示 (Ag, Bg, Au, Bu), 整数 m 代表第 R 壳层按第 l 个不可约表示变换的基函数的编号. 例如,对 $R = 0$ 壳层,它们是

$$\begin{aligned} |Ag01\rangle &= \frac{1}{2} (AU_1 + AD_1 + AU_3 + AD_3); \\ |Ag02\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (AU_2 + AD_2); \\ |Ag03\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (AU_4 + AD_4); \\ |Bg01\rangle &= \frac{1}{2} (AU_1 + AD_1 - AU_3 - AD_3); \\ |Au01\rangle &= \frac{1}{2} (AU_1 - AD_1 - AU_3 + AD_3); \\ |Bu01\rangle &= \frac{1}{2} (AU_1 - AD_1 + AU_3 - AD_3); \\ |Bu02\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (AU_2 - AD_2); \\ |Bu03\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (AU_4 - AD_4). \end{aligned} \quad (2)$$

对于 $R = 1$ 壳层,由镜面类的两个原子 DU 和 DD 构成的基函数有 8 个, 它们是 $|Ag1m\rangle$, $|Bu1m\rangle$ ($m = 1, 2, 3$) 和 $|Au11\rangle$, $|Bg11\rangle$; 其中由指向双空位的键组成的基函数,有

$$|Ag11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (DU_1 + DD_1),$$

$$|Bu11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(DU_2 - DD_1).$$

由一般类的 4 个原子组成的基函数有 16 个, 它们是 $|Ag1m\rangle$, $|Au1m\rangle$, $|Bg1m\rangle$ 和 $|Bu1m\rangle$ ($m = 1, 2, 3, 4$); 其中指向双空位键组成的基函数, 有

$$|Ag11\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}(BU_1 + CD_3 + BD_1 + CU_3);$$

$$|Au11\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}(BU_1 + CD_3 - BD_1 - CU_3);$$

$$|Bg11\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}(BU_1 - CD_3 + BD_1 - CU_3);$$

$$|Bu11\rangle = \frac{1}{\sqrt{4}}(BU_1 - CD_3 - BD_1 + CU_3).$$

三、扩展的 Koster-Slater 模型

1. 扩展的缺陷势

对 Jahn-Teller 畸变的双空位缺陷势, 采取扩展的 Koster-Slater 势^[4]

$$V = \sum_i V^i,$$

$$V^i = \sum_{Rm} \sum_{R'm'} |lRm\rangle \langle lRm| V |lR'm'\rangle \langle lR'm'|. \quad (3)$$

为了计算上的简化, 将 V 仅扩展到缺陷的最近邻原子上; 并分别考虑图 2 中所示的两种重要的对称畸变模 EG1 和 EG2. 鉴于在图 2 中 EG1 畸变, 镜面类原子 (d, d') 的位移背向缺陷, 相对地比一般类原子 (b, b', c, c') 远离缺陷; 因此, 作为进一步简化, 对图 2 中的 EG1 模只考虑双空位原子轨道与一般类原子轨道的非对角矩阵元, 忽略与镜面类原子的非对角矩阵元. 对图 2 中 EG2 畸变, 只考虑双空位原子轨道与镜面原子轨道的非对角矩阵元, 忽略与一般类原子的非对角矩阵元. 这样, EG1 和 EG2 畸变势在 Ag, Bu 不可约表示中都将引入以下参数:

$$\begin{aligned} V_{mm'} &= \langle l0m | V | l0m' \rangle \quad (m, m' = 1, 2, 3); \\ V_{m1} &= \langle l0m | V | l11 \rangle = V_{1m}; \\ V_{11} &= \langle l11 | V | l11 \rangle. \end{aligned} \quad (4a)$$

而在 Au, Bg 不可约表示中, 将引入的参数为

$$\begin{aligned} V_{11} &= \langle l01 | V | l01 \rangle; \\ V_{12} &= \langle l01 | V | l11 \rangle = V_{21}; \\ V_{22} &= \langle l11 | V | l11 \rangle. \end{aligned} \quad (4b)$$

2. 决定双空位电子波函数的方程组

被短程势 V 束缚在双空位缺陷的电子态 $|\phi\rangle$ 满足以下方程:

$$|\phi\rangle = G(E)V|\phi\rangle, \quad (5)$$

式中 $G(E) = 1/(E - H_0)$, H_0 是单电子近似下基体哈密顿量, 其本征值 $E_{n,h}$ 和本征矢 $|\phi_{n,h}\rangle$ 由下式给出:

$$H_0|\phi_{n,h}\rangle = E_{n,h}|\phi_{n,h}\rangle. \quad (6)$$

将缺陷电子态 $|\psi\rangle$ 用 C_{2h} 的不可约表示的基函数 $|lRm\rangle$ 作展开,

$$|\psi'\rangle = \sum_{Rm} |lRm\rangle \langle lRm|\psi'\rangle. \quad (7)$$

将(3)和(7)式代入(5)式, 对 $l = Ag, Bu$, 则有

$$\begin{aligned} \langle lRm|\psi'\rangle &= \langle lRm|G|l01\rangle C_1 \\ &+ \langle lRm|G|l02\rangle C_2 \\ &+ \langle lRm|G|l03\rangle \\ &+ \langle lRm|G|l11\rangle C_4, \end{aligned} \quad (8)$$

式中

$$\begin{aligned} C_1 &= V_{11}\langle l01|\psi'\rangle + V_{12}\langle l02|\psi'\rangle \\ &+ V_{13}\langle l03|\psi'\rangle + V_{14}\langle l11|\psi'\rangle; \\ C_2 &= V_{21}\langle l01|\psi'\rangle + V_{22}\langle l02|\psi'\rangle \\ &+ V_{23}\langle l03|\psi'\rangle + V_{24}\langle l11|\psi'\rangle; \\ C_3 &= V_{31}\langle l01|\psi'\rangle + V_{32}\langle l02|\psi'\rangle \\ &+ V_{33}\langle l03|\psi'\rangle + V_{34}\langle l11|\psi'\rangle; \\ C_4 &= V_{41}\langle l01|\psi'\rangle + V_{42}\langle l02|\psi'\rangle \\ &+ V_{43}\langle l03|\psi'\rangle + V_{44}\langle l11|\psi'\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

对双空位缺陷势, 采取轨道移去法, 对 $l = Ag, Bu$, 应有

$$\langle l0m|\psi'\rangle = 0 \quad (m = 1, 2, 3). \quad (10)$$

由(8)式可得 C_i 的线性齐次方程组

$$\begin{aligned} G_{11}C_1 + G_{12}C_2 + G_{13}C_3 + G_{14}C_4 &= 0; \\ G_{21}C_1 + G_{22}C_2 + G_{23}C_3 + G_{24}C_4 &= 0; \\ G_{31}C_1 + G_{32}C_2 + G_{33}C_3 + G_{34}C_4 &= 0, \end{aligned} \quad (11)$$

式中 $G_{mn} = \langle l0m|G|l0n\rangle$, $G_{m4} = \langle l0m|G|l11\rangle$ $m, n = 1, 2, 3$.

再由归一化条件

$$\langle \psi'|\psi'\rangle = \langle \psi'|VG^2V|\psi'\rangle = 1, \quad (12)$$

得到 C_i 的另一方程

$$-\sum_{m,n=1}^3 C_m C_n \frac{dG_{mn}}{dE} = 1. \quad (13)$$

(13)和(8)式为我们在扩展势近似下, 求解 Jahn-Teller 畸变的双空位电子波函数的一组方程。由此求得的波函数是深能级 E 的函数。

求解(11), (13)式, 进而由(8)式求解波函数, 都归结为计算格林函数的矩阵元

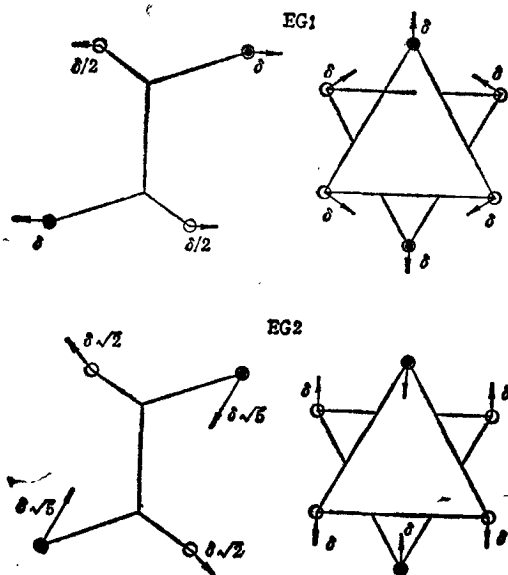


图2 双空位与其6个近邻原子的畸变模 EG1 和 EG2 的侧视图(左)、顶视图(右) 黑点代表表面类原子; 圆圈代表一般类原子

$$\begin{aligned}\langle lRm|G|l0m'\rangle &= \sum_{nk} \frac{\langle lRm|nk\rangle\langle nk|l0m'\rangle}{E - E_{nk}}, \\ \langle lRm|l11\rangle &= \sum_{nk} \frac{\langle lRm|nk\rangle\langle nk|l11\rangle}{E - E_{nk}}.\end{aligned}\quad (14)$$

在计算中, 用 Papaconstantopoulus 等人^[12]的包括三近邻的 TB 哈密顿量 H_0 描述基体能带, 因为以往的工作^[13]指出, 在扩展势的情况下, 它对缺陷态的描述, 比其它 TB 能带要好些. 我们还用特殊点法^[14]代替了(14)式中对 k 的求和. 对 $l = Ag, Bu$, 也可获得决定波函数的方程组, 然后作同样处理.

3. 超精细相互作用常数

为用算得的对称波函数 $\langle lRm|\phi'\rangle$ 计算超精细相互作用常数, 将 $|\phi'\rangle$ 再用缺陷周围格点上的原子轨道作展开

$$|\phi'\rangle = \sum_i [C_{is}^i|js\rangle + C_{ix}^i|jp_x\rangle + C_{iy}^i|jp_y\rangle + C_{iz}^i|jp_z\rangle], \quad (15)$$

式中 $|js\rangle, |jp_x\rangle, |jp_y\rangle, |jp_z\rangle$ 是第 i 个硅原子的 3s 和 3p 轨道; 而 $C_{is}^i = \langle js|\phi'\rangle$, $C_{ix}^i = \langle jp_x|\phi'\rangle$, $C_{iy}^i = \langle jp_y|\phi'\rangle$, $C_{iz}^i = \langle jp_z|\phi'\rangle$, 都可从各壳层的 $\langle lRm|\phi'\rangle$ 求出.

在 EPR 和 ENDOR 实验中, 对双空位观察到的超精细相互作用张量都是近似轴对称的. 在这种情况下, $C_{is}, C_{ix}, C_{iy}, C_{iz}$ (略去了上标 l) 与超精细相互作用常数的各向同性部分 a_i 和各向异性部分 b_i 有如下关系^[10]:

$$\begin{aligned}a_i &= C_{is}^i F_\alpha; \\ b_i &= (C_{ix}^i + C_{iy}^i + C_{iz}^i) F_\beta; \\ C_i &= 0.\end{aligned}\quad (16)$$

式中 F_α, F_β 分别为

$$\begin{aligned}F_\alpha &= \frac{8\pi}{3} g_e g_n \mu_B \mu_n |\phi_{3s}(0)|^2; \\ F_\beta &= \frac{2}{5} g_e g_n \mu_B \mu_n \langle r^{-3} \rangle_{3p},\end{aligned}\quad (17)$$

式中 g_e 是未配对电子的 g 因子, g_n 是第 i 个原子核的 g 因子, μ_B 是玻尔磁子, μ_n 是核磁子. $|\phi_{3s}(0)|^2$ 是 Si 原子的 3s 轨道在它的原子核位置上的几率密度, $\langle r^{-3} \rangle_{3p}$ 是 Si 原子的权重过的 3p 轨道 r^{-3} 的期待值. 在我们的计算中取 $|\phi_{3s}(0)|^2$ 和 $\langle r^{-3} \rangle_{3p}$ 的值与文献 [1—3] 相同.

习惯上用 η^2 表示未配对电子在一个原子上的几率, 即

$$\eta^2 = C_s^2 + C_x^2 + C_y^2 + C_z^2. \quad (18)$$

用 α^2 和 β^2 表示该原子上波函数 s 和 p 特性的百分数, 即

$$\alpha^2 = C_s^2/\eta^2; \beta^2 = (C_x^2 + C_y^2 + C_z^2)/\eta^2; \alpha^2 + \beta^2 = 1. \quad (19)$$

在 EPR 和 ENDOR 实验中, 对于双空位, 超精细相互作用张量的轴方向在镜面内, 用 θ 表示它与镜面内 $\langle 110 \rangle$ 方向之间的夹角. 那末, 利用位于镜面上原子波函数之间的关系: $|C_{py}| = |C_{px}| \neq |C_{pz}|$, 则 θ 角可表示为

$$\theta = \tan^{-1} \left| \frac{C_{pz}}{\sqrt{2} C_{py}} \right|. \quad (20)$$

四、计算结果

鉴于现有的实验不能确定缺陷的电荷态 V_i^+ 和 V_i^- 分别处于哪种对称态,下面逐个采取图 2 中的两种畸变模 EG1 和 EG2,且令图 2 中的 $\delta = 0.04a_0$,对双空位的 4 个可能的对称态 Ag , Bg , Au 和 Bu 的波函数 (α^2 , β^2 , η^2),超精细相互作用常数 (a_i , b_i) 和超精细相互作用张量的轴方向 θ 进行了计算。它们都是能量 E 的函数。其结果是:

1. 在 EG1 模畸变下,使 E 在禁带内变化,找到 V_i^+ 处于 $E = 0.3\text{eV}$ 的 Ag 态, V_i^- 处于 $E = 0.63\text{eV}$ 的 Bu 态,可得到与实验值符合得很好的各物理量的最佳值。其具体数值列在表 1 中。

表 1 在 EG1 模下, V_i^+ 处于 Ag 和 V_i^- 处于 Bu 态有关理论值和实验值的比较

原子类	EG1													
	$Ag(V_i^+)$							$Bu(V_i^-)$						
	$E(\text{eV})$	$a(\text{MHz})$	$b(\text{SMHz})$	θ°	α^2	β^2	η^2	$E(\text{eV})$	$a(\text{MHz})$	$b(\text{MHz})$	θ°	$\alpha^2(\%)$	$\beta^2(\%)$	$\eta^2(\%)$
M_1	0.30 (0.27)	152.2 (147.7)	22.3 (28.0)	32.4 (34.8)	14.3 (11.0)	85.7 (89.0)	25.7 (31.0)	0.63 (0.59)	203.0 (195.2)	17.8 (23.3)	37.4 (37)	22.3 (17.0)	77.7 (83.0)	22.1 (27.7)
M_2	(0.25) (0.32)	1.1 (14.87)	1.7		2.2	97.8	1.49	(0.76) (0.57)	8.6 (11.4)	1.78 (1.98)		10.6 (12.3)	89.4 (87.7)	1.95 (2.23)
G_1	(0.11) (0.23)	8.84 (22.53)	2.30		8.6	91.4	2.46	(0.78) (0.62)	31.60 (31.47)	1.95 (2.23)		28.1 (25.6)	71.9 (74.4)	2.71 (2.97)
G_2		3.2 (19.17)	0.2		34.0	66.0	0.21	(0.63)	2.92 (19.9)	0.7 (3.17)		9.8 (13.3)	90.2 (86.7)	0.73 (3.61)

注:表中带小括号的数值为实验值; a, b 来自文献[1,2,3]; E 来自文献[7]所总结的实验数值; $\alpha^2, \beta^2, \eta^2$ 来自文献[2,3,15]。

2. 在 EG2 模畸变下,找到 V_i^- 处于 $E = 0.75\text{eV}$ 的 Bu 态,只得到与 V_i^- 的实验值相符合的各物理量最佳值,其具体数值列在表 2 中。表 2 内的各物理量的单位与表 1 的相同。

表 2 在 EG2 模下, V_i^- 处于 Bu 态有关理论值与实验值的比较

原子类	EG2 Bu 态(V_i^-)						
	E	a	b	θ°	α^2	β^2	η^2
M_1	0.73 (0.59)	194.3 (195.2)	14.5 (23.3)	37.8 (37)	24.6 (17.0)	75.4 (83.0)	19.0 (27.7)
M_2	(0.76) (0.57)	10.1 (11.4)	1.78 (1.98)		12.0 (12.3)	88.0 (87.7)	1.95 (2.23)
G_1	(0.78) (0.62)	42.1 (31.47)	2.8 (2.23)		25.9 (25.6)	(74.1) (77.4)	4.01 (2.97)
G_2	(0.63)	3.30 (19.9)	0.81 (3.17)		9.4 (13.3)	89.6 (86.7)	0.84 (3.61)

五、讨论和结论

1. 我们采用扩展的 Koster-Slater 模型, 分别考虑 EG1 和 EG2 模, 计算了双空位电荷态 V_i^+ 和 V_i^- 的近邻、次近邻原子波函数的局域性 (η^i) 及其 S, P 波特性和 (α^i, β^i)。超精细相互作用常数 a_i, b_i 和超精细相互作用张量的轴方向。获得了理论值与实验值符合得很好的结果, 并且确定的能级位置也同现有实验资料相符合。从表 1 和表 2 的数值比较可以看到, 第 1 壳层 M 类原子和 G 类原子的 a, b 理论值与实验值几乎都相同。波函数 $\alpha^i, \beta^i, \eta^i$ 有些系统的偏离。但是, 当我们注意到, 实验上直接观察的波函数是 $\eta^2\alpha^2, \eta^2\beta^2$, 利用表 1 中 $\alpha^i, \beta^i, \eta^i$ 的数值, 立即发现第 1 壳层各原子的 $\eta^2\alpha^2, \eta^2\beta^2$ 理论值和实验值几乎相等, 表 2 中的次之。 η^i 理论值比实验值偏低, 其原因是, V_i^+, V_i^- 电子波函数在其周围各壳层原子上的几率的总和应为 $\sum_i \eta_i^2 = 100\%$, 我们的波函数满足这一条件, 而提供实验值的文献[2,3]的 $\sum_i \eta_i^2 \geq 119\%$ 。

2. 表 1 和表 2 的结果表明, V_i^+ 的未配对电子只能占据 EG1 模畸变下的 $E = 0.3\text{eV}$ 的 A_g 态; V_i^- 可以占据 EG1 模畸变下的 $E = 0.63\text{eV}$ 的 B_u 态, 也可以占据 EG2 模畸变下的 $E = 0.73\text{eV}$ 的 B_u 态。但不论 V_i^+ 和 V_i^- 周围的畸变模相同与否, 可得到结论是: V_i^+ 处于 A_g 对称态, V_i^- 处于 B_u 对称态; V_i^+ 能级在 V_i^- 之下。若将表 1 和表 2 中的 B_u 态的理论值同实验值进行仔细比较可知, EG1 模也是 V_i^- 的 B_u 态的最优选的畸变。于是, 我们认为 V_i^+, V_i^- 两种电荷态周围有同一畸变模 (EG1), V_i^+ 处于 $E = 0.3\text{eV}$ 的 A_g 态, V_i^- 处于 $E = 0.63\text{eV}$ 的 B_u 态。这个结论与 Watkins 等人^[4]从简单考虑得到的结论相同, 而且 V_i^+, V_i^- 的能级位置也完全相符合。

A_g 能级主要对应于镜面上最近邻的 d 和 d' 之间成键轨道, 而 B_u 能级主要由于其反键轨道引起的, 所以, B_u 能级高于 A_g 能级, 这样的能级次序是合理的。有的文献[7]仅仅计算了畸变下的能级, 而未具体地计算 a, b 和 θ 等量, 就确定 B_u 态在 A_g 态之下是缺乏说服力的。

3. 如前所述, EG1 模可能描述了双空位 Jahn-Teller 畸变的主要特征。虽然, 文献[2]曾考虑过 EG1 和 EG2 畸变, 他们采用的理论, 不能对硅的能带给以好的描述, 所以都未能给出好的结果。为了确信这一点, 我们用 Vogl 等人^[12]的能带, 重复以上计算, 其结果是, 在两种畸变模下, 在禁带内, 不能同时找到描述 V_i^+, V_i^- 的超精细相互作用常数和超精细相互作用张量轴方向的对称态。有关文献[12]和[17]中的两个能带的比较, 见文献[13]。

4. 我们对 V_i^+ 算得的 M_{2z}, G_{1z}, G_{2z} 比实验上的小得多。这很可能是由于我们考虑的双空位的畸变过于简化引起的。也可能实验上由于不能精确测量^[2], 而估算过高引起的偏离。

5. 本文将文献[12]的能带应用于研究双空位, 采取轨道移去法。但正如 Lanno 所指出的那样, 这个能带包括了三中心积分, 所以不能看作通常的为产生空位而将轨道移去。

我们认为这也是能成功的描述 Jahn-Teller 畸变下, V_1^+ , V_1^- 超精细相互作用常数和能级的一个因素。

作者感谢贾勇强博士、秦国刚教授和黄昆教授的有益讨论。

本课题得到河南省科学技术委员会的支持。

- [1] G. D. Watkins and J. W. Corbett, *Phys. Rev.*, **138A**(1965), 543.
- [2] J. G. de Wit, E. G. Sieverts and C. A. J. Ammerlaan, *Phys. Rev.*, **B14**(1976), 3494.
- [3] E. G. Sieverts, S. H. Muller and C. A. J. Ammerlaan, *Phys. Rev.*, **B18**(1978), 6834.
- [4] T. F. Lee and T. C. McGill, *J. Phys.*, **C6**(1973), 3438.
- [5] C. A. J. Ammerlaan and J. C. Wolfrat, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **89**(1978), 85.
- [6] R. G. Humphreys, S. Brand and M. Jaros, *J. Phys.*, **C16**(1983), 337.
- [7] A. Fazzio, J. R. Leite and M. J. Caldas, *Physica*, **116B**(1983), 90.
- [8] S. T. Pantelides, I. Lvanov, M. Sheffler and J. P. Vigeron, *Physica*, **116B**(1983), 18.
- [9] S. Y. Ren, D. Q. Mao and M. F. Li, *Superlattices and Microstructures*, **1**(1985), 375.
- [10] Y. Q. Jia and G. G. Qin, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 2605.
- [11] J. Callaway, *Math. Phys.*, **5**(1964), 783.
- [12] D. A. Papaconstantopoulos and E. N. Economou, *Phys. Rev.*, **B22**(1980), 2903.
- [13] Fan Xi-qing, Zhang De-xuan and Shen San-guo, *物理学报*, **37**(1988), 178.
- [14] D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **B8**(1973), 5747.
- [15] E. G. Sieverts, *Phys. Stat. Sol. (b)*, **120**(1983), 11.
- [16] 任尚元、茅德强、李名复, *物理学报*, **34**(1985), 455; **35**(1986), 808; **35**(1986), 1457.
- [17] P. Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solids*, **44**(1983), 365.

THEORETICAL CALCULATIONS FOR HYPERFINE INTERACTIONS OF THE JAHN-TELLER DISTORTED DIVACANCY IN SILICON

FAN XI-QING SHEN SAN-GUO ZHANG DE-XUAN
(Department of Physics, Zhengzhou University)

ABSTRACT

For two main Jahn-Teller distortion modes of the divacancy in Si, hyperfine interactions of the unpaired electron of both negative and positive charged states (V_1^- , V_1^+) are calculated by using extended Koster-Slater model. The calculated results in agreement with the experiments are obtained. From these, we determine that the unpaired electron of V_1^+ is located at the symmetric state A_g of the energy level at 0.3eV and the V_1^- is located at the symmetric state B_u of the energy level at 0.63eV. We infer that the EG1 mode is the preferential mode of distortion for both V_1^- and V_1^+ .