

硅中 Jahn-Teller 畸变的磷-空位 复合缺陷的电子结构

申 三 国 范 希 庆

郑州大学物理系, 郑州, 450052

1989 年 12 月 25 日收到

本文采用扩展的缺陷势, 利用一个紧束缚的 Koster-Slater 格林函数方法, 确定了磷-空位缺陷的波函数为深能级 E 的函数. 以深能级的实验值为输入参数, 得到的波函数定量地描述了 EPR 和 ENDOR 实验资料. 特别是, 理论给出空位的四个近邻原子上的超精细相互作用常数 a 和 b , 同实验符合得很好.

PACC: 7155; 7630; 7670D

一、引 言

硅中磷-空位 (PV) 是实验上早已确定的替代缺陷对之一. Watkins 和 Corbett 的电子顺磁共振 (EPR) 与电子-核子双共振 (ENDOR) 实验^[1]给出了 PV 的超精细相互作用常数, 揭示了它的电子结构, 并指出有大的晶格畸变. Sonder 和 Templeton 的霍尔系数与电阻率的实验^[2], 确定 PV 在禁带中引入一条深能级 $E_c + 0.68\text{eV}$. 在理论上, Sankey 和 Dow^[3] 曾在理想情况下(不考虑晶格弛豫), 用缺陷对“分子模型”讨论了硅中替代杂质对的一般化学趋势, 并以 PV 缺陷为例, 论述了空位与其最近邻杂质配对后, 对空位的深能级不应有显著的改变. 对 PV 缺陷的电子波函数以及超精细相互作用常数的理论描述还未见报道. 在位势或扩展势近似下, 采用 Koster-Slater 格林函数方法, 贾勇强和秦国刚^[4]计算了硅中单空位的超精细相互作用常数. 我们也计算了硅中单空位、双空位、三空位和四空位^[5]的超精细相互作用常数, 得到与实验符合很好的结果. 在本文中, 我们试图将这种方法加以推广, 应用到杂质-空位复合缺陷上来. 对空位原子势仍采取轨道移去近似; 对杂质原子势用 Hjalmarson 等人^[6]的规则构成. 这两种势都是局域的, 忽略了杂质势的长程库仑势的成分. 在此基础上, 我们获得了 Jahn-Teller 畸变的零级近似对称 (C_{1v}) 波函数, 并用它计算了超精细相互作用常数, 张量 g 移动等物理量. 通过与实验比较, 表明上述方法用来描述硅中磷-空位对的电子结构是成功的.

二、缺陷的原子结构和对称基函数

EPR 和 ENDOR^[1] 实验确定的磷-空位缺陷的原子结构如图 1 所示. 空位原子位于

原点(000),坐标 X, Y, Z 沿晶体主轴方向. 杂质磷原子 c 位于空位近邻格点($\bar{1}\bar{1}$)上,其它三个近邻硅原子 a, b, d 分别位于($\bar{1}11$), ($11\bar{1}$), ($\bar{1}\bar{1}\bar{1}$)格点上,体系具有 C_{3v} 对称性.

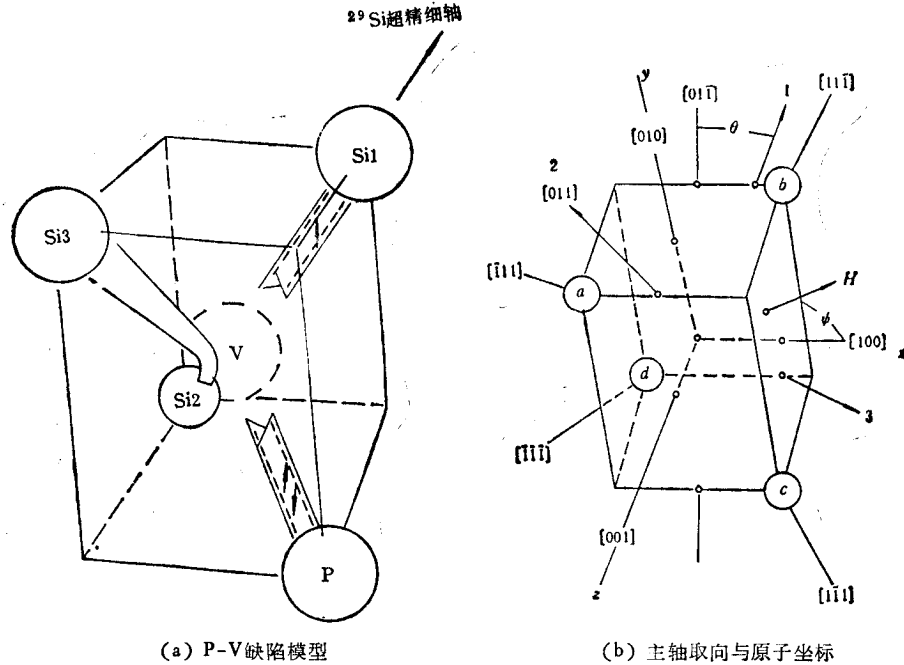


图1 Watkins 的 P-V 缺陷原子结构

由于 Jahn-Teller 畸变,体系的对称性降低为 C_{1s} , 对称面为(011)面. 将缺陷周围的原子分为两类: 在对称面上的原子, 称为 M 类; 不在对称面上的原子, 称为 G 类. 在 C_{1s} 的群元操作下, 属于 M 类的原子, 只是自身互换; 属于 G 类的原子, 可有两个互换.

硅中替代杂质-空位对, 当其周围的格点没发生 Jahn-Teller 畸变时, 它所引起的短程势 V_0 具有 C_{3v} 对称性; 发生 Jahn-Teller 畸变后, 又引入一个小的微扰 ΔV , 具有 C_{1s} 对称性. 这样, 缺陷势

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

于是, 缺陷电子波函数应按 C_{1s} 不可约表示变换. 尽管不知微扰 ΔV 的大小, 但我们还是可用理想的替代杂质-空位对的波函数来构成按 C_{1s} 的不可约表示变换的波函数. 当然, 这样得到的波函数是微扰后的零级波函数.

为获得缺陷零级 C_{1s} 对称波函数的表达式, 在这一节, 我们先构成按 C_{1s} 不可约表示变换的基函数. 以杂质-空位对为中心, 将其周围的硅原子分成壳层, 利用每个原子的 sp^3 杂化轨道, 按壳层构成 C_{1s} 群的不可约表示的基函数. 硅中格点上的原子的杂化轨道方向有两种: 一种为图 1 中所示的空位原子的杂化轨道方向 $[\bar{1}11], [11\bar{1}], [1\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}\bar{1}]$, 把对应于空位原子的四个杂化轨道分别记作 V_1, V_2, V_3, V_4 ; 另一种为空位四个近邻原子的杂化轨道方向 $[1\bar{1}\bar{1}], [\bar{1}\bar{1}1], [\bar{1}1\bar{1}], [111]$, 将杂质原子的四个杂化轨道简记作 I_1, I_2, I_3, I_4 . 其它三个近邻硅原子的杂化轨道仿此标记, 如 A_1 代表图 1 中硅原子 a 的方向为 $[1\bar{1}\bar{1}]$ 的杂化轨道, 如此等等. 采用投影算符法, 容易将各壳层原子的杂化轨道构成 C_{1s}

群的不可约表示的基函数 $|Rm\rangle$, 它代表 R 壳层按 $l = (A', A'')$ 不可约表示变换的第 m 个基函数。现举例说明如下:

空位和杂质两个原子构成 $R = 0$ 壳层, 这两个原子都属于 M 类, 各自的杂化轨道构成 C_{1h} 群的不可约表示基函数。如构成的 A' 的不可约表示基函数为

对空位原子

$$\begin{aligned} |A'01\rangle &= (V_1 + V_4)/\sqrt{2}, \\ |A'02\rangle &= V_2, \\ |A'03\rangle &= V_3. \end{aligned} \quad (2)$$

对杂质原子

$$\begin{aligned} |A'04\rangle &= (I_1 + I_4)/\sqrt{2}, \\ |A'05\rangle &= I_2, \\ |A'06\rangle &= I_3. \end{aligned} \quad (3)$$

对于 $R = 1$ 壳层, 由 G 类原子 a 和 d 的悬挂键构成的 A' 不可约表示的基函数为

$$|A'11\rangle = (A_1 + D_4)/\sqrt{2}. \quad (4)$$

由 M 类原子 b 的悬挂键构成的 A' 不可约表示的基函数为

$$|A'12\rangle = B_2. \quad (5)$$

用 $R = 1$ 壳层的其它原子的杂化轨道仿此可构成 A' 不可约表示的基函数。

EPR 和 ENDOR 实验^[4]发现, 缺陷电子在最近邻的 b 原子的悬挂键上有最大的几率分布。但 b 原子的悬挂键参与 A' 不可约表示的对称化组合, 而不参与 A'' 对称化组合。由此可确定, 缺陷体系只可能处于 A' 对称态。

三、扩展势的 Koster-Slater 模型

1. 缺陷电子波函数

按照 Koster-Slater 模型, 被缺陷的短程势 V 束缚的电子态 $|\phi\rangle$ 满足

$$|\phi\rangle = G(E)V|\phi\rangle. \quad (6)$$

其中 $G(E) = 1/(E - H_0)$, 为基体哈密顿量 H_0 的格林函数, H_0 的本征值 $E_{n\mathbf{k}}$ 和本征矢 $|n\mathbf{k}\rangle$ 由下式给出:

$$H_0|n\mathbf{k}\rangle = E_{n\mathbf{k}}|n\mathbf{k}\rangle. \quad (7)$$

为使电子态具有 C_{1h} 对称性, 将 $|\phi\rangle$ 按 C_{1h} 的 A' 不可约表示的基函数 $|A'Rm\rangle$ 展开

$$|\phi\rangle = \sum_{Rm} |A'Rm\rangle \langle A'Rm|\phi\rangle. \quad (8)$$

再将缺陷势 V 按 A' 不可约表示进行分解

$$V = \sum_{Rm} \sum_{R'm'} |A'Rm\rangle \langle A'Rm|V|A'R'm'\rangle \langle A'R'm'|. \quad (9)$$

对于替代杂质-空位对缺陷, 其电子结构主要确定于空位原子及其近邻原子上的势。我们将 V 扩展到 $R = 1$ 壳层, 由于 Jahn-Teller 畸变, 最近邻的 a, d 原子构成“弯键”, 离空位原子比其它原子近。作为粗略的近似, 我们仅将 V 扩展到 $R = 1$ 壳层的 a, d 原子

上。这样,引入的势参数有: $V_{mm} = \langle A'0m|V|A'0m\rangle (m = 1, 2, \dots, 6)$, $V_{17} = \langle A'01|V|A'11\rangle = V_{71}$, $V_{77} = \langle A'11|V|A'11\rangle$ 。

将(8),(9)式代入(6)式,得

$$\langle A'Rm|\phi\rangle = \sum_{n=1}^6 \langle A'0m|G|A'0n\rangle C_n + \langle A'0m|G|A'11\rangle C_7. \quad (10)$$

其中系数 c 分别为

$$\begin{aligned} C_1 &= V_{11}\langle A'01|\phi\rangle + V_{17}\langle A'11|\phi\rangle, \\ C_2 &= V_{22}\langle A'02|\phi\rangle, \\ C_3 &= V_{33}\langle A'03|\phi\rangle, \\ C_4 &= V_{44}\langle A'04|\phi\rangle, \\ C_5 &= V_{55}\langle A'05|\phi\rangle, \\ C_6 &= V_{66}\langle A'06|\phi\rangle, \\ C_7 &= V_{77}\langle A'11|\phi\rangle + V_{71}\langle A'01|\phi\rangle. \end{aligned} \quad (11)$$

对空位原子,采取轨道移去近似,则有 $V_{11}, V_{22}, V_{33} \rightarrow \infty$, $\langle A'01|4\rangle, \langle A'02|4\rangle, \langle A'03|4\rangle \rightarrow 0$, 而 C_1, C_2, C_3 为有限量。由(10)式可得三个系数 C 的线性齐次方程。

对杂质原子,将(3)式中的对称化基函数 $|A'04\rangle, |A'05\rangle, |A'06\rangle$ 换用杂质原子的 s 和 P 轨道表示,可证 V 的矩阵元

$$\begin{aligned} V_{44} &= V_s, \\ V_{55} &= \langle A'05|V|A'05\rangle = V_p = V_{66}. \end{aligned} \quad (12)$$

其中 V_s 和 V_p 为杂质原子在其格点上引起的 s 和 P 对称势。 V_s 和 V_p 的值由下面的经验近似公式^[6]给出:

$$\begin{aligned} V_s &= \beta_s[\omega(s, i) - \omega(s, h)], \\ V_p &= \beta_p[\omega(p, i) - \omega(p, h)]. \end{aligned} \quad (13)$$

其中 $[\omega(s, i) - \omega(s, h)]$, $[\omega(p, i) - \omega(p, h)]$ 分别为杂质原子与基体原子的 s 和 P 轨道的能级之差; $\beta_s = 0.8$, $\beta_p = 0.6$ 。利用求得的 V_s, V_p 的值,由(10)式可得系数 C 的另三个线性齐次方程。这样,对空位原子轨道采取移去近似,对杂质原子上的势采取(13)式,得到的六个系数 C 的线性齐次方程为

$$\begin{aligned} G_{11}C_1 + G_{12}C_2 + G_{13}C_3 + G_{14}C_4 + G_{15}C_5 + G_{16}C_6 + G_{17}C_7 &= 0, \\ G_{21}C_1 + G_{22}C_2 + G_{23}C_3 + G_{24}C_4 + G_{25}C_5 + G_{26}C_6 + G_{27}C_7 &= 0, \\ G_{31}C_1 + G_{32}C_2 + G_{33}C_3 + G_{34}C_4 + G_{35}C_5 + G_{36}C_6 + G_{37}C_7 &= 0, \\ G_{41}C_1 + G_{42}C_2 + G_{43}C_3 + (G_{44} - 1/V_s)C_4 + G_{45}C_5 + G_{46}C_6 + G_{47}C_7 &= 0, \\ G_{51}C_1 + G_{52}C_2 + G_{53}C_3 + G_{54}C_4 + (G_{55} - 1/V_p)C_5 + G_{56}C_6 + G_{57}C_7 &= 0, \\ G_{61}C_1 + G_{62}C_2 + G_{63}C_3 + G_{64}C_4 + G_{65}C_5 + (G_{66} - 1/V_p)C_6 + G_{67}C_7 &= 0. \end{aligned} \quad (14)$$

其中 $G_{mn} = \langle A'0m|G|A'0n\rangle$, $G_{m7} = G_{7m} = \langle A'0m|G|A'11\rangle (m, n = 1, 2, \dots, 6)$ 。再由归一化条件 $\langle \phi|\phi\rangle = 1$, 给出系数 C 的另一方程为

$$-\sum_{m=1}^7 \sum_{n=1}^7 C_m \frac{dG_{mn}}{dE} C_n = 1. \quad (15)$$

(14)和(15)式中的格林函数的矩阵元由下式给出:

$$\langle A'Rm|G|A'0m' \rangle = \sum_{nk} \frac{\langle A'Rm|nk \rangle \langle nk|A'0m' \rangle}{E - E_{nk}}, \quad (16)$$

$$\langle A'Rm|G|A'11 \rangle = \sum_{nk} \frac{\langle A'Rm|nk \rangle \langle nk|A'11 \rangle}{E - E_{nk}}.$$

当格林函数的矩阵元 G_{mn} 和 V_s, V_p 求出后, 由(14)和(15)式可解得系数 C 为缺陷能量 E 函数, 进而由(10)式求得的波函数 $\langle A'Rm|\phi \rangle$ 也为 E 的函数. 在计算(16)式时, 我们用一个紧束缚的能带^[7]描述基体, 用特殊点^[8]代替对 k 的求和.

2. 超精细相互作用常数

为用算得的对称化波函数计算各原子上的超精细相互作用常数, 将 $|\phi \rangle$ 再用空位周围格点上的原子轨道作展开

$$|\phi \rangle = \sum_j [C_{js}|js \rangle + C_{jx}|jx \rangle + C_{jy}|jy \rangle + C_{jz}|jz \rangle]. \quad (17)$$

其中 $|js \rangle, |jx \rangle, |jy \rangle, |jz \rangle$ 是第 j 个原子的 s 和 p 轨道; $C_{js} = \langle js|\phi \rangle$, $C_{jx} = \langle jp_x|\phi \rangle$, $C_{jy} = \langle jp_y|\phi \rangle$, $C_{jz} = \langle jp_z|\phi \rangle$, 可从对称波函数 $|A'Rm|\phi \rangle$ 求出. 缺陷电子波函数在第 j 原子上的几率为

$$\eta_j^2 = C_{js}^2 + C_{jx}^2 + C_{jy}^2 + C_{jz}^2. \quad (18)$$

波函数在该原子上的 s 和 p 特征的百分数为

$$\alpha_j^2 = C_{js}^2/\eta_j^2,$$

$$\beta_j^2 = (C_{jx}^2 + C_{jy}^2 + C_{jz}^2)/\eta_j^2,$$

$$\alpha_j^2 + \beta_j^2 = 1. \quad (19)$$

按照原子轨道线性组合方案对超精细相互作用常数的描述, 各向同性部分 a 和各向异性部分 b 与 α_j^2, β_j^2 和 η_j^2 有如下关系:

$$a_j = (16\pi/3)(\mu_j/I_j)\mu_B\alpha_j^2\eta_j^2|\phi_{jz}(0)|^2,$$

$$b_j = 4/5(\mu_j/I_j)\mu_B\beta_j^2\eta_j^2\langle r_{jp}^{-3} \rangle. \quad (20)$$

其中 μ_B 为 Bohr 磁子, (μ_j/I_j) 是第 j 个原子核的磁矩与自旋之比. 对于 ^{29}Si , $|\phi_{jz}(0)|^2 = 31.5 \times 10^{24}\text{cm}^{-3}$, $\langle r_{jp}^{-3} \rangle = 16.1 \times 10^{24}\text{cm}^{-3}$; 对于杂质 ^{31}P , $|\phi_{jz}(0)|^2 = 41.6 \times 10^{24}\text{cm}^{-3}$, $\langle r_{jp}^{-3} \rangle = 24.2 \times 10^{24}\text{cm}^{-3}$.

另外, 利用镜面上原子的 $3p$ 波函数之中, 一定有两个分量的绝对值相等, 例如 $|C_{jx}| \neq |C_{jy}| = |C_{jz}|$, 还可计算 M 类原子的超精细相互作用张量的轴方向与镜面内 $\langle 011 \rangle$ 方向之间的夹角^[4]

$$\theta = \tan^{-1} \frac{|C_{jx}|}{|\sqrt{2}C_{jy}|}. \quad (21)$$

3. 张量 g

利用算得的波函数还可以计算悬挂键上的张量 g . 不过目前对张量 g 的分析还不完善, 仅能用半经验的理论进行讨论. 通常认为张量 g 是轴对称的, 把张量 g 分解为平行于轴方向的值 g_{\parallel} 和垂直于轴方向的值 g_{\perp} . 在一般情况下, 张量 g 并不是严格对称的, 这时

选取三个主值中的两个近似相等的主值进行平均,取作 g_{\perp} , 将第三个主值取作 g_{\parallel} . 为反应某缺陷张量 g 的特点,常用 g_{\parallel} 和 g_{\perp} 与自由电子 g_0 因子 ($g_0 = 2.0023$) 之差来讨论,即

$$\delta g_{\parallel} = g_{\parallel} - g_0,$$

$$\delta g_{\perp} = g_{\perp} - g_0.$$

对于类-空穴的成键态, $\delta g_{\perp} > 0$. 对于类-电子的反键态, $\delta g_{\perp} < 0$. 对于一个真正的缺陷态,给出的 δg_{\perp} 表示成键态和反键态之差. 对于单个悬挂键上的(图 1 中的 Si1 原子)缺陷电子波函数的几率约为 60% 的缺陷,一般 $\delta g_{\parallel} \approx 0$.

关于 δg_{\perp} 的计算公式, Watkins 和 Corbett^[1] 从包括未配对电子在磁场中的自旋-轨道耦合相互作用项的哈密顿量出发,首先导出 δg_{\perp} 的表达式. 后来 Phillips^[9] 又加以修正,给出较为精确的表达式

$$\delta g_{\perp} = \beta^2 \eta^2 \left(\frac{1+\nu}{E_b} \lambda_b - \frac{1-\nu}{E_a} \lambda_a \right). \quad (22)$$

其中 $\lambda_b = 0.029\text{eV}$, $\lambda_a = 0.015\text{eV}$, 分别为成键和反键态上的自旋-轨道相互作用参数; $E_b = 1.5\text{eV}$, $E_a = 2.5\text{eV}$, 分别为从束缚态到价带和导带的平均激发能量; 参数 $\nu = 0.17$.

四、结果与讨论

我们将硅中磷-空位对的深能级 $E = E_v + 0.68\text{eV}$ 作为输入参数,按照第三节中所述的方法,计算了缺陷电子的 A' 对称波函数 $\langle A' R m | \psi \rangle$; 由(17)式求出 C_{j_0} , C_{j_2} , C_{j_1} , C_{j_3} , 代入(18),(19)式,得到波函数在第 j 个原子的几率 η_j^2 , s 和 p 特征的百分数 α_j^2 , β_j^2 ; 再由(20),(21),(22)式得到该原子上的超精细相互作用常数 a_j , b_j , θ 角和张量 g 的移动 δg_{\perp} . 由于现有的实验值仅限于空位的四个近邻原子,表 1 中仅给出这几个原子的有关物理量的理论值.

表 1 空位的四个近邻原子上的超精细相互作用常数 a_j , b_j , 和波函数的分布几率 η_j^2 , s 和 p 特征 α_j^2 , β_j^2 , θ 角和张量 g 的移动 δg_{\perp} (a_j 和 b_j 以 10^{-4}cm^{-1} 为单位,括号中的量为实验值,取自文献[1])

原子	a	b	α^2	β^2	η^2	δg_{\perp}	$\theta(^{\circ})$
Si1	136.9 (115.7)	12.60 (17.2)	0.21 (0.14)	0.79 (0.86)	0.472 (0.59)	6.6‰ (8.1‰)	35.65 (35.3)
Si2 Si3	13.27 (12.4)	0.90 (...)	0.263 (0.30)	0.737 (0.70)	0.036 (0.03)		
p	9.32 (9.32)	0.46 (0.63)	0.358 (0.29)	0.642 (0.71)	0.007 (0.01)		172.3 (163.5)

1. 比较表 1 中各物理量的理论值和实验值可知,一般二者之差在 10% 左右,这是令人满意的理论结果. 对空位的近邻原子 Si1, 理论给出约 50% 的波函数局域在该原子的悬挂键上,是实验值的 80%, 而 β^2 比实验值小 8%. 关于 β^2 的理论值小,这是由于我们的模型没有考虑 Si1 原子的晶格弛豫引起的. 正如 Watkins 等人^[1]所指出的,背离空位而移动具有悬挂键的原子将会增大悬挂键的 p 特征.

2. 对于 Si2 和 Si3 原子, 实验^[1]仅能直接估算 a 的值. 为确定 η^2 , Watkins 和 Corbett^[1] 假定 $\alpha^2 = 30\%$, $\beta^2 = 70\%$. 我们的理论给出的 η^2 , α^2 和 β^2 , 以及由此算得的 a 和 b 都与他们的结果几乎相等, 这就从理论上定量地肯定了他们的估算和假定.

3. 对杂质原子上的 η^2 , α^2 和 β^2 以及 a 和 b 的理论值与实验值也符合得很好.

4. 实验确定原子 Si1 的悬挂键上的张量 g 是轴对称的. 由(22)式给出的张量 g 移动 $\delta g_{\perp} > 0$, 其大小是实验值的 85%. 这说明理论很好地反映了张量 g 的近似轴对称性.

5. 理论给出波函数局域在空位的四个近邻原子的几率为 55.1%, 为实验值的 85%. 但是如果注意到 Sievert 等人^[10]曾指出, 按局域分子模型处理的 EPR 和 ENDOR 的实验值, 一般给出的 $\Sigma\eta_j^2$ 约为 120%, 而不是 100%. 我们的理论给出的波函数是严格归一化的, $\Sigma\eta_j^2 = 100\%$. 即 $(\Sigma\eta_j^2)_{\text{理论}}/(\Sigma\eta_j^2)_{\text{实验}} \approx 83\%$, 说明我们给出的波函数在空位的四个近邻原子上的几率可能更合理些.

五、结 论

我们将磷-空位缺陷的缺陷势扩展到空位的最近邻原子上, 采用 Koster-Slater 模型, 导出了确定缺陷电子态的波函数为能级 E 的函数[(10)–(16)式]. 由此算得的空位的四个近邻原子上的 η^2 , α^2 , β^2 和 a , b 都与实验值符合得很好. 连同我们以往对双空位、四空位^[5]的成功描述, 说明采用扩展势的 Koster-Slater 模型可以概括硅中多空位和杂质-空位对的基本特征. 实验已观察到硅中 (V, P), (V, As), (V, Sb), (V, Bi)^[11] 在禁带中引入的深能级很相近, $E = E_v + 0.68 - E_v + 0.72\text{eV}$. 这意味着, 本文提出的确定磷-空位波函数 (E 的函数)的方法, 也适用于其他五族杂质-空位复合缺陷. 有关这些缺陷的讨论, 将在另文中给出.

本课题得到河南省基础及应用科学研究所和河南省科学技术委员会的资助.

- [1] G. D. Watkins and J. W. Corbett, *Phys. Rev.*, **A136**(1964), 1359.
- [2] E. Sonder and L. C. Templeton, *J. Appl. Phys.*, **34**(1963), 3295.
- [3] O. F. Sankey and J. D. Dow, *Phys. Rev.*, **B26**(1982), 3243.
- [4] Y. Q. Jia and G. G. Qin, *Phys. Rev.*, **B37**(1988), 2605.
- [5] 范希庆、张德萱、申三国, *物理学报*, **37**(1988), 177;
范希庆、申三国、张德萱, *物理学报*, **38**(1989), 908;
范希庆、申三国、张德萱, *物理学报*, **38**(1989), 914;
申三国、范希庆、张德萱、任尚元, *物理学报*, **39**(1990), 970.
- [6] H. P. Hjalmarson, P. Vogl, D. J. Wolford and J. D. Dow, *Phys. Rev. Lett.*, **44**(1980), 810; P. Vogl, H. P. Hjalmarson and J. D. Dow, *J. Phys. Chem. Solids*, **44**(1981), 365.
- [7] D. A. Papaconstantopoulos and E. N. Economou, *Phys. Rev.*, **B22** (1980), 2903.
- [8] D. J. Chadi and M. L. Cohen, *Phys. Rev.*, **B8**(1973), 5747.
- [9] J. C. Phillips, *Comments Solid State Physics*, **3**(1970), 67.
- [10] E. G. Sievert, S. H. Muller and C. A. J. Ammerlaan, *Phys. Rev.*, **B18**(1978), 6834.
- [11] E. L. Elkin and G. D. Watkins, *Phys. Rev.*, **174**(1968), 1973; M. Hirata *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **5** (1966), 252.

ELECTRONIC STRUCTURE OF JAHN-TELLER DISTORTED PHOSPHOROUS-VACANCY COMPLEX IN SILICON

SHEN SAN-GUO FAN XI-QING

Department of Physics, Zhengzhou University, Zhengzhou, 450052

(Received 25 December 1989)

ABSTRACT

Under the extended defect potential approximation, the electronic wave function which is a function of the PV defect energy has been derived using a tight binding Koster-Slater Green function technique. Taking the experimental value of the defect energy level as input parameter, the obtained wave function describes quantitatively the data of the electron paramagnetic resonance and electron-nuclear double resonance. Especially, the hyperfine interaction constants of the four nearest neighbor atoms around the vacancy given by the theory, are in good agreement with the experiment.

PACC: 7155; 7630; 7670D