

менателей брать необходимые степени оставшегося $C \left[\frac{p+q+1}{2} \right]$; тогда любой рациональный инвариант получается из этой совокупности рядом алгебраических операций.

Поскольку, согласно сказанному выше, полиномиальных инвариантов у группы Вейля нет, то число инвариантных операторов равно

$$\tau_{W(p,q)} = \left[\frac{p+q-1}{2} \right]. \quad (6)$$

Из (6) следует, что, например, группы Вейля в двумерном пространстве вообще не имеют инвариантов, а группа $W(3)$ имеет рациональный инвариант, который согласно [3] записывается в виде

$$C = \frac{P^2}{(M \cdot P)^2}.$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Дёмичев А. П., Нелипа Н. Ф. Инвариантные операторы неоднородных групп. I. Группа $IGL(n, R)$.—Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон., 1980, 21, № 2, с. 3—7.
2. Дёмичев А. П., Нелипа Н. Ф. Инвариантные операторы неоднородных групп. II. Группа $ISL(n, R)$.—Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон., 1980, 21, № 2, с. 7—10.
3. Дёмичев А. П., Нелипа Н. Ф. Инвариантные операторы неоднородных групп. III. Группа $ISO(p, q)$.—Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон., 1980, 21, № 4, с. 23—27.
4. Дёмичев А. П., Нелипа Н. Ф., Чайчиан М. Инвариантные операторы неоднородных групп. IV. Унитарные и симплектические группы.—Вестн. Моск. ун-та. Физ., астрон., 1980, 21, № 4, с. 27—31.
5. Abellanas L., Martines Alonso L. A general setting for Casimir invariants.—J. Math. Phys., 1975, 16, p. 1580—1584.
6. Вейль Г. Классические группы. Их инварианты и представления. М., 1947, с. 353.
7. Rosen J. Construction of invariants for Lee algebras of inhomogeneous pseudo-orthogonal and pseudo-unitary groups.—J. Math. Phys., 1968, 9, 1305—1307.

Поступила в редакцию
17.05.78

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1980. т. 21, № 5

УДК 539.283:546.26—162

В. Н. ЛАЗУКИН, А. Н. ТЕРЕНТЬЕВСКИЙ, Ф. М. МУРЮМИН,
В. А. ЛАПТЕВ, Ю. Н. БЕЛОУСОВ

ЭПР-СПЕКТР АЗОТА В ЕСТЕСТВЕННОЙ И ИСКУССТВЕННОЙ РЕШЕТКАХ АЛМАЗА

Имея достаточно простую структурную решетку, алмаз обладает уникальными свойствами, загадочность которых вот уже много лет подогревает исследовательский интерес к его тайнам. В самом деле, до настоящего времени со всей очевидностью не доказано, какова валентность углерода, образующего решетку алмаза, какие примеси (исключая азот) входят или могут входить в структурную композицию решетки алмаза, и многое другое. Спектроскопические методы исследований, в частности ЭПР, получившие значительное развитие в последнее время, внесли некоторую ясность в эти проблемы. Утверж-

дается, например, что в решетку алмаза могут внедряться элементы Al, Si, Mg, Ti, Cr, Fe, Ni [1—6], однако о характере вхождения этих элементов, равно как и об их валентности, мало еще что известно, не говоря уже о том, что следует с известной долей осторожности воспринимать достоверность этих утверждений. Одним словом, комплексное решение всех проблем, связанных с алмазом, хотя уже и начато, но далеко не закончено.

Целью настоящей работы было детальное исследование ЭПР-спектров азота в естественной решетке и сравнение их с аналогичными спектрами, полученными от искусственных образцов. ЭПР-спектр азота наиболее часто встречается в публикациях по алмазу, и в силу этого, казалось бы, он должен быть наиболее полно изучен. Тем не менее

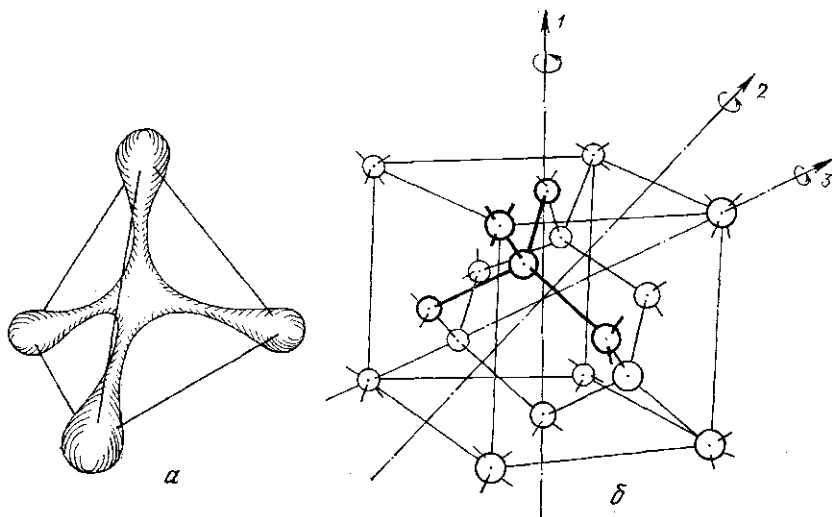


Рис. 1

это не так, и данная работа в какой-то мере дополнит все еще не полученную в комплексе картину ЭПР-спектра азота в алмазе. В качестве естественного образца был взят алмаз африканского происхождения (любезно предложенный нам Ю. Л. Орловым), частично изученный в работах [7, 8]. Искусственные образцы были выращены в ВНИИСМС. Образцы исследовались на превосходной установке ЭПР-3, разработанной под руководством А. Г. Семенова.

Как уже упоминалось, решетка алмаза проста и детально изучена [9]. Ее, например, можно представить в виде куба, заполненного четырьмя углеродными тетраэдрами (рис. 1). Пять атомов углерода, образующие тетраэдр, соединены прямыми линиями, условно обозначающими структурные связи. (На рис. 1, б, один из тетраэдров выделен жирными линиями). Идеальность структурной решетки, видимо, можно оценивать по-разному; но в данном случае решетка идеальна не только тем, что четыре тетраэдра образуют правильный куб, но и тем, что связи строго параллельны, о чем со всей очевидностью говорят наши экспериментальные данные. Как известно, электронная структура свободного атома углерода состоит из трех оболочек $1s^2$, $2s^2$, $2p^2$, причем p -оболочка заполнена лишь двумя электронами. Существует мнение, что в ковалентных связях алмаза участвуют четыре внешних электрона, образуя при этом гибридные sp^3 -орбитали [5].

Принимая это утверждение за наиболее достоверное, можно вообразить пространственную картину вероятности электронной плотности, изображенную на рис. 1, а, причем следует подчеркнуть качественный характер рисунка.

Отметим, что в предложенной модели электронной плотности валентные электроны уже не принадлежат отдельным атомным остовам, а образуют замкнутую электронную орбиталь, вероятностная конфигурация которой и изображена на рисунке. Как известно из атомной физики, замкнутые оболочки образуются двумя s^2 , шестью p^6 , десятью d^{10} , четырнадцатью f^{14} , восемнадцатью g^{18} и т. д. электронами. И если считать электронную орбиталь (пусть даже гибридную) тетраэдрического комплекса как нечто единое, то предпочтительнее рассматривать ее как орбиталь, заполненную десятью (двухвалентный углерод), а не двадцатью (четыревалентный углерод) электронами, так как только в первом случае эта орбиталь будет иметь нулевой магнитный момент (заполненная оболочка). Если атом азота замещает углерод, то лишний валентный электрон, ответственный за спектр ЭПР, локализуется не на какой-то отдельной связи, а принадлежит всей тетраэдрической орбитали, т. е. существует отличная от нуля вероятность нахождения электрона вблизи каждого из атомных остовов тетраэдрического комплекса. Таким образом, если тетраэдрические связи, изображенные на рис. 1, б, прямыми линиями, заменить моноорбиталью типа изображенной на рис. 1, а, то получится модель, исходя из которой в этой работе объясняется угловая зависимость спектров ЭПР азота в решетке естественного алмаза. Отметим строгую параллельность соответствующих отростков тетраэдрической орбитали четырех тетраэдров, образующих правильный куб. Именно это обстоятельство характеризует идеальность структурной решетки и соответствующим образом проявляется в угловом смещении ЭПР-спектров. В качестве осей вращения образца были выбраны оси, отмеченные на рис. 1 цифрами 1, 2, 3.

Как известно, сверхтонкий спектр азота в алмазе описывается выражением [7]

$$H_{M,m} = H_0 - Km - \frac{K^2}{2H_0} [I(I+1) - m^2] + \frac{K^2}{2H_0} [S(S+1) - m(2M-1)], \quad (1)$$

где $H_{M,m}$ — резонансное поле для сверхтонкого перехода с квантовыми индексами M и m , $H_0 = hv_0/g\beta$, K — константа сверхтонкого расщепления, S , I — электронный и ядерный спин соответственно, M , m — проекции электронного и ядерного спинов соответственно.

Константа сверхтонкого взаимодействия для азота в алмазе, как известно, является анизотропной, поэтому справедливо соотношение

$$K_i^2 = A_{\parallel}^2 \cos^2 \gamma_i + A_{\perp}^2 \sin^2 \gamma_i \quad (2)$$

или

$$K_i^2 = (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) \cos^2 \gamma_i + A_{\perp}^2, \quad (3)$$

где γ_i — угол между вектором поля \mathbf{H} и осью симметрии одного из «отростков» тетраэдрической орбитали.

Если γ_i выразить через α , (α — половина угла между связями) и θ (θ — угол поворота образца относительно вектора поля \mathbf{H}), то угловое смещение ЭПР-спектра азота в алмазе для случая ориентации образца, при которой ось вращения занимает положение, обозначенное цифрой 1 на рис. 1, будет таким, как это показано на рис. 2.

При этом для константы K выполняются соотношения

$$K_{1,2}^2 = (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) \cos^2(90 - \alpha) \cos^2 \theta + A_{\perp}^2,$$

$$K_{3,4}^2 = (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) \cos^2(90 - \alpha) \sin^2 \theta + A_{\perp}^2, \quad (4)$$

где $K_{1,2,3,4}$ — константы сверхтонкого взаимодействия, характеризующиеся соответствующим углом ψ_i .

Поскольку эксперимент позволяет определить значение $A_{\parallel} = 40,8 \pm \pm 0,1$ Э и $A_{\perp} = 28,4 \pm 0,1$ Э, то можно, пользуясь соотношением (4), довольно точно вычислить угол $\alpha = 54,5^\circ$. По-видимому, экспериментальное определение угла между связями из данных по угловым смещениям ЭПР-спектров азота в алмазе проделано впервые.

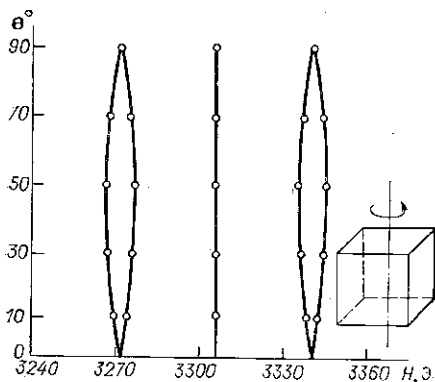


Рис. 2

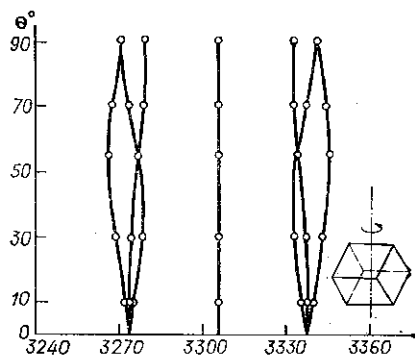


Рис. 3

При ориентации образца, характеризуемой осью вращения, отмеченной цифрой 2 на рис. 1, угловое смещение ЭПР-линий представлено на рис. 3. В этом случае для констант сверхтонкого взаимодействия выполняются соотношения

$$K_{1,2}^2 = (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) \cos^2 \alpha \cos^2 \theta + A_{\perp}^2,$$

$$K_3^2 = (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) \cos^2(\theta - \alpha) + A_{\perp}^2,$$

$$K_4^2 = (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) \cos^2(\theta + \alpha) + A_{\perp}^2. \quad (5)$$

И, наконец, последний вариант возможен в том случае, если ось вращения задается направлением 3 (см. рис. 1). Для константы K здесь выполняются соотношения

$$K_1^2 = A_{\perp}^2,$$

$$K_2^2 = (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) \cos^2(2\alpha - 90^\circ) \cos^2 \theta + A_{\perp}^2,$$

$$K_3^2 = (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) \cos^2(2\alpha - 90^\circ) \sin^2(\theta + 30^\circ) + A_{\perp}^2,$$

$$K_4^2 = (A_{\parallel}^2 - A_{\perp}^2) \cos^2(2\alpha - 90^\circ) \sin^2(\theta - 30^\circ) + A_{\perp}^2. \quad (6)$$

Угловая зависимость ЭПР-спектров для этого случая представлена на рис. 4. Отметим, что во всех трех случаях угловые спектры выражены функцией аргумента θ , меняющегося от 0 до 90° .

Существуют по крайней мере два варианта объяснения этих экспериментально наблюдаемых зависимостей. Можно предположить, что

один из тетраэдров, образующих куб, содержит в своем центре азот. И, естественно, число таких азотосодержащих тетраэдров определяется статистическим законом. В силу того что тетраэдные связи строго параллельны между собой, статистический характер азотосодержащих тетраэдров никак не скажется при постановке вышеописанных экспериментов, при условии, что азотный ЭПР-ный электрон локализован на всех связях с равной долей вероятности. Вторым вариантом заключается в том, что ЭПР-ный электрон локализуется на отдельной связи, а эти избранные связи должны быть ориентированы статистическим образом. Но в этом случае необходимо придумать механизм, ведущий к избранной локализации электрона. Такого механизма нет, и поэтому предпочтение должно быть отдано первому варианту.

И в заключение любопытно сравнить ЭПР-спектры азота в естественном и искусственном алмазах. На рис. 5, а, показан ЭПР-спектр азота в естественном образце при ориентации, характеризующейся тремя сверхтонкими линиями (полуширина линии $\sim 1,5$ Э). Те же самые ли-

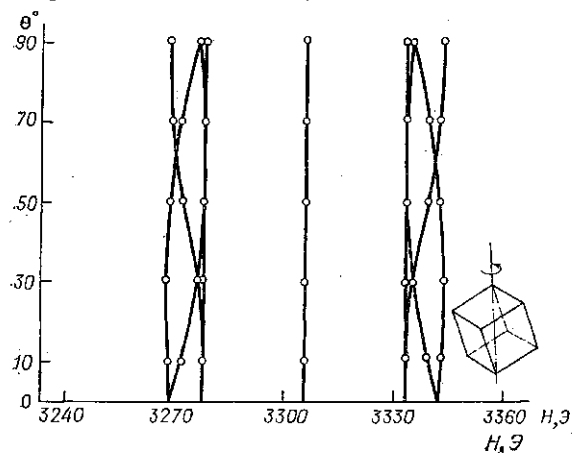


Рис. 4

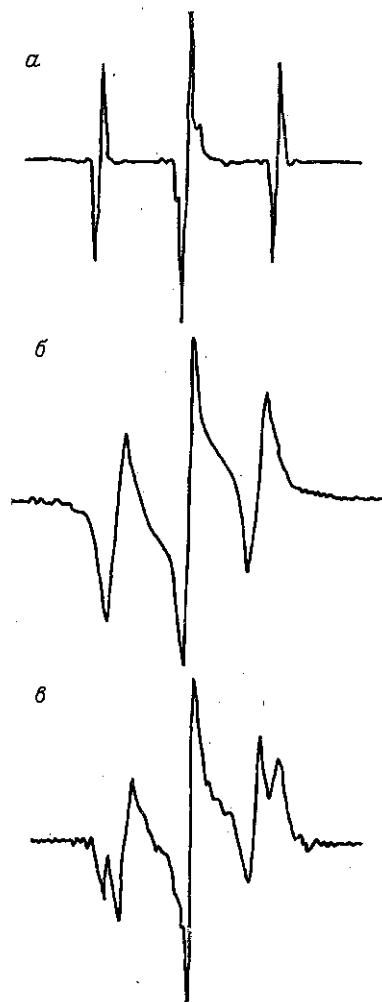


Рис. 5

нии, но для искусственного образца, отличаются значительной полушириной, порядка 12 Э (рис. 5, б). В искусственном образце не удалось наблюдать разнообразия углового смещения сверхтонких линий, характерного для естественного образца. Максимальное смещение ограничено всего лишь раздвоением боковых сверхтонких линий азота (рис. 5, в). И если условиться совершенство структуры соотносить с угловыми ЭПР-спектрами, т. е. с вышеописанной моделью тетрагональных орбиталей и их пространственным расположением по объему образца, то станет ясно, сколь многого еще следует добиться в технологии выращивания алмазов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Самсоненко Н. Д. О распределении парамагнитных центров азота в некоторых алмазах типа I.— Физ. тв. тела, 1964, 6, № 10, с. 3086—3088.
2. Соболев Е. В., Боких Г. Б., Дворянкин В. Ф., Самсоненко Н. Д. О корреляции оптических и ЭПР-спектров природных алмазов типа I.— Ж. структ. химии, 1964, 5, № 5, с. 557—561.
3. Faulkner E. A., Whippey P. W., Newman R. C. Electron spin resonance in diamond coat.— *Phyl. Mag.*, 1965, 12, N 118, p. 413—414.
4. Bower H. J., Symons M. C. R. Electron spin resonance spectra associated with nitrogen in diamonds.— *Nature*, 1966, 210, N 5040, p. 1037—1038.
5. Smith W. V., Sorokin P. P., Gelles I. L., Lasher G. J. Electron spin resonance of nitrogen donors in diamond.— *Phys. Rev.*, 1959, 115, N 6, p. 1546—1552.
6. Smith M. J. A., Angel B. R. Some electron spin resonance properties of heat treated synthetic diamond.— *Phyl. Mag.* 1967, 15, N 136, p. 783—796.
7. Лазукин В. Н., Терентьевский А. Н. О возможном происхождении спектра электронного парамагнитного резонанса ионов азота в алмазе.— ДАН СССР, 1969, 187, № 5, с. 1032—1034.
8. Лазукин В. Н., Терентьевский А. Н. Экспериментальное наблюдение ионов $^{13}\text{C}^{4+}$, $^{29}\text{Si}^{4+}$, $^{77}\text{Se}^{4+}$, S^+ в решетке алмаза методом электронного парамагнитного резонанса.— ДАН СССР 1969, 188, № 5, с. 1026—1027.
9. W yckoff R. W. G. Crystal structures. Chapter II. p. 10 Interscience Publishers. N. Y., 1948.

Поступила в редакцию
05.09.78

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1980, т. 21, № 5

УДК 537.595

Ч. А. ТРЕТЬЯКОВА, В. Я. ШЕСТОПЕРОВ

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР АДРОНОВ НА УРОВНЕ МОРЯ

В настоящей работе проводится анализ экспериментальных энергетических спектров адронов на уровне моря в диапазоне энергий 10^{11} — 10^{13} эВ, полученных разными авторами. Интерес к этому вопросу вызван тем, что несколько лет назад группа сотрудников Лидского университета (Барух и др. [1]) получила необычный результат. Его необычность заключается в следующем. Известно, что спектры адронов на разных глубинах в атмосфере в широком интервале энергий описываются степенной функцией $F(E) = AE^{-\gamma}$, которая в двойном логарифмическом масштабе имеет вид прямой линии. Полученный в Лидсе спектр в двойном логарифмическом масштабе имеет ступенчатый вид. В области энергий 10^{11} — 10^{12} эВ этот спектр, по словам авторов, подтверждается измерениями Аштона и др. [2, 3], при энергиях $\sim 10^{13}$ эВ — измерениями Дмитриева [4]. Наличие ступеньки авторы объясняют существованием тяжелой, длиннопробежной частицы.

Поиски этой новой частицы, предпринятые некоторыми физиками, не дали положительных результатов [5, 6, 7]. Как будет показано ниже, энергетические спектры адронов на уровне моря, полученные другими авторами, не обнаруживают резких отклонений от степенной зависимости интенсивности адронов от их энергии. Тем не менее Барух с сотрудниками настаивают на правильности своих результатов и опубликовали новое доказательство существования тяжелой частицы [8].

В связи с этим мы сочли полезным указать на возможную ошибку