

УДК 548.3:534.01

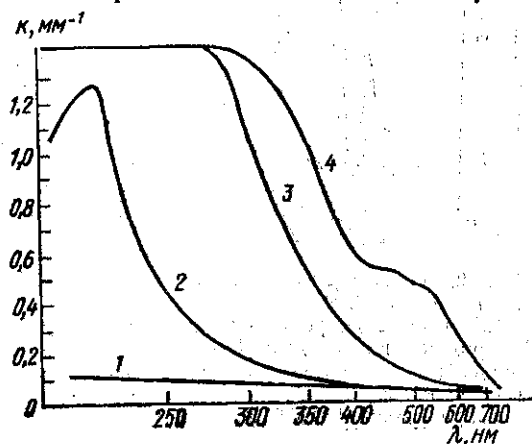
## ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ИНТЕНСИВНОСТИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ В КРИСТАЛЛАХ КВАРЦА С ИСКУССТВЕННО ВВЕДЕННЫМИ ДЕФЕКТАМИ

Л. П. Осипова, М. А. Смирнова, М. В. Новаковская

(кафедра общей физики для физического факультета)

Ранее была обнаружена аномальная температурная зависимость интенсивности комбинационного рассеяния (КР) света в природных кристаллах кварца (содержащих примеси алюминия, щелочных металлов и др.), облученных смешанными гамма-нейтронными потоками [1]. В частности, интенсивность линий в спектре КР 128 и 466  $\text{см}^{-1}$  при повышении температуры облученного образца уменьшалась, тогда как необлученного — увеличивалась. Экспериментальные зависимости были объяснены влиянием ангармоничности колебаний, связанной с образованием радиационных дефектов. После отжига облученного кварца температурная зависимость интенсивности постепенно приближалась к зависимости для необлученного кристалла. В работе [1] также установлено, что одновременно с уменьшением ангармоничности облученных кристаллов при отжиге происходит

Рис. 1. Коэффициент поглощения кварца в области 200—700 нм: 1 — необлученные образцы; 2 — синтетический кварц, доза  $5 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup> (толщина образца 0,15 мм); 3 — синтетический кварц (доза  $5 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup>); 4 — природный кварц (доза  $5 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup>)



полное разрушение алюминиевых центров окраски. На основе этих экспериментальных данных было высказано предположение о том, что именно образование алюминиевых центров окраски приводит к изменению температурной зависимости интенсивности КР, а следовательно, и к усилению ангармоничности колебаний кристалла. Однако в кристаллах, облученных быстрыми нейтронами дозой  $\sim 4 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup> и изученных в [1], имелись не только алюминиевые центры окраски, но и структурные точечные дефекты (непримесной природы), соответствующие им центры окраски и некоторое количество аморфизованных микрообластей [2].

Для выяснения причин возникновения ангармоничности колебаний и для установления ее связи с тем или иным типом дефектов, в частности с алюминиевыми центрами окраски, в настоящей работе впервые исследована температурная зависимость интенсивности КР света в синтетических кристаллах кварца, которые не содержали примеси алюминия и в которых при облучении гамма-нейтронными потоками возникала более простая совокупность дефектов, чем в природных.

Образцы синтетического и природного кварца одновременно облучались быстрыми нейтронами дозой  $\sim 5 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup>. Синтетические кристаллы после облучения оставались бесцветными, а природные приобретали интенсивную бурю окраску. Результаты, полученные для синтетических образцов, сравнивались с данными для природных кристаллов. Контроль за образованием радиационных центров окраски, структурных точечных дефектов, разупорядоченных областей, а также за движением примесных ионов осуществлялся по спектрам поглощения в области  $\sim 200$ — $700$  нм и в ближней ИК-области  $\sim 3000$ — $4000$  см<sup>-1</sup>. Методики температурных исследований облученных кристаллов кварца, записи и обработки спектров КР и спектров поглощения изложены в работах [1—4].

Как видно из кривой 2 рис. 1, в спектре поглощения облученного синтетического кристалла отсутствуют полосы  $A_1$  ( $\sim 450$  нм) и  $A_2$

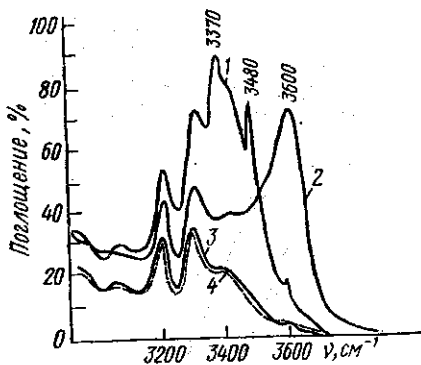


Рис. 2. ИК-спектры поглощения кварца в области  $3000$ — $4000$  см<sup>-1</sup>; 1 — необлученный природный кварц; 2 — природный кварц, доза  $5 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup>; 3 — необлученный синтетический кварц; 4 — синтетический кварц, доза  $5 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup>

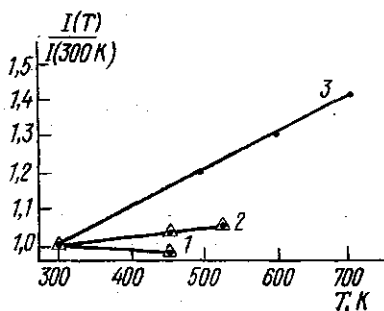


Рис. 3. Температурная зависимость относительной интенсивности линии  $466$  см<sup>-1</sup> в спектре КР синтетического ( $\Delta$ ) и природного ( $\bullet$ ) кварца: после облучения образца дозой  $5 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup> (отжиг при  $420^\circ\text{C}$  — 1 и  $520^\circ\text{C}$  — 2) и без облучения (3)

( $\sim 620$  нм). Существование этих полос связано с наличием алюминиевых центров окраски [5]. В то же время в спектре природного кварца (содержащего примесь алюминия) эти полосы имеются (см. кривую 4 рис. 1). Кроме того, в спектрах синтетического и природного кварца наблюдается интенсивное крыло ультрафиолетовой полосы поглощения (с максимумом при  $\lambda \approx 210$  нм), обусловленной образованием центров окраски на структурных точечных дефектах непримесной природы, которые генерируются под воздействием нейтронов [5].

На рис. 2 приведены спектры инфракрасного поглощения в области  $\sim 3000$ — $4000$  см<sup>-1</sup> синтетического и природного кварца до и после облучения дозой  $5 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup>.

Из рис. 2 (кривая 3) видно, что в спектре синтетического необлученного кристалла (не содержащего примеси алюминия и ионов щелочных металлов) отсутствуют полосы в ИК-области  $3000$ — $4000$  см<sup>-1</sup>, связанные [4, 6] с Al—ОН-дефектами. В спектре природного необлученного кристалла эти полосы отчетливо видны (кривая 1).

После облучения в ИК-спектре природного кристалла (см. рис. 2, 2) появляется широкая полоса  $\sim 3600$  см<sup>-1</sup>, которая связана с колебаниями ОН-групп, расположенных внутри аморфизованных областей [4,

7]. В спектре синтетического кварца (рис. 2, 4) поглощение в области  $3600 \text{ см}^{-1}$  при облучении увеличивается незначительно. Таким образом, воздействие потока  $5 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup> создает в синтетическом образце преимущественно структурные точечные дефекты и соответствующие им центры окраски.

Из результатов, приведенных на рис. 3, следует, что для облученного синтетического кварца (не содержащего примеси алюминия, а следовательно, и Al-центров окраски) температурная зависимость интенсивности линии  $466 \text{ см}^{-1}$  совпадает с зависимостью для обычного природного кристалла, содержащего примесь алюминия.

Для объяснения наблюдаемых закономерностей естественно предположить, что усиление ангармоничности колебаний решетки кварца связано с наличием дефектов, общих для исследованных синтетических и природных кристаллов. При облучении синтетического (чистого) и природного (содержащего примеси) кварца потоками быстрых нейтронов дозой меньше  $10^{19}$  нейтрон/см<sup>2</sup> такими дефектами преимущественно являются структурные точечные дефекты непримесной природы и соответствующие им центры окраски. Поэтому можно предположить, что именно структурные точечные дефекты и связанные с ними центры окраски изменяют ангармоничность кристаллов, что проявляется, в частности, в аномальной температурной зависимости интенсивности линии КР.

Обычно экспериментальные кривые сравниваются с теоретической температурной зависимостью интенсивности линий КР, полученной в гармоническом приближении [8—10]:

$$I_{\text{гарм}} = I_0 \overline{(\nu + 1)}, \quad (1)$$

где  $I_0 \sim (\alpha'_{\rho\sigma})^2$ ;  $\alpha'_{\rho\sigma}$  — производная тензора электрооптической поляризуемости по нормальной координате, а

$$\overline{\nu} = (\exp\{h\nu_j/kT\} - 1)^{-1}$$

— среднее число фононов, соответствующих данной нормальной координате.

Отклонение экспериментальной температурной зависимости интенсивности линий КР от гармонического приближения (1) можно объяснить влиянием ангармоничности (как механической, так и электрооптической [8—11]) основных колебаний решетки, обязанной образованию дефектов.

Влияние электрооптической ангармоничности (учет в  $I_0$  наряду с  $\alpha'_{\rho\sigma}$  высших производных тензора поляризуемости по нормальным координатам) рассмотрено в работах [9, 10].

В [10] показано, что в приближении  $h\nu_j \ll kT$

$$I_0 = I_{0 \text{ гарм}} (1 + B_1 T)^2,$$

где

$$B_1 = \frac{1}{6h\nu_j} \left( \frac{\partial^3 \alpha_{\rho\sigma}}{\partial q_j \partial q_j^2} \right) b_j^2 \left( \frac{\partial \alpha_{\rho\sigma}}{\partial q_j} \right)^{-1},$$

$\nu_j$  — частота колебательной моды, с которой преимущественно взаимодействует мода  $\nu_j$  [10].

Поправка  $B_1 T$ , как правило, мала, поэтому

$$(1 + B_1 T)^2 \approx 1 + 2B_1 T.$$

Для изучения вклада механической ангармоничности при вычислении множителя  $\overline{\nu + 1}$  необходимо учесть высшие производные в раз-

ложении потенциальной энергии кристалла в ряд по нормальным координатам. Оценки, выполненные нами для случая  $h\nu_j \ll kT$ , показывают, что

$$\overline{\nu + 1} \simeq (1 + B_2 T),$$

где

$$B_2 = \frac{6\Delta E k}{h^2 \nu_j^2},$$

а  $\Delta E$  — ангармоническая постоянная.

Кроме того, механическая ангармоничность может привести к появлению высших гармоник в колебательном спектре. Одновременный учет высших гармоник и высших производных тензора поляризуемости приводит к появлению в (1) еще одного множителя, равного

$$(1 + B_3 T)^2 \simeq 1 + 2B_3 T,$$

где

$$B_3 = \frac{\gamma}{12m(2\pi\nu_j)^3} \left[ \left( \frac{\partial^2 \alpha_{\rho\sigma}}{\partial q_j^2} \right) \left( \frac{\partial \alpha_{\rho\sigma}}{\partial q_j} \right)^{-2} \right],$$

а  $\gamma$  — коэффициент при кубическом члене в разложении потенциальной энергии по степеням нормальных координат.

Таким образом, температурную зависимость стоксовых линий КР с учетом электрооптической и механической ангармоничности можно представить в виде

$$I_\nu(T) \sim I_{\text{гарм}}(1 + B_\nu T), \quad (2)$$

где  $B = 2B_1 + B_2 + 2B_3$ . Причем  $B_2 > 0$ , а  $B_1$  и  $B_3$  могут быть отрицательными.

Из сравнения (2) с экспериментальной зависимостью для линии  $466 \text{ см}^{-1}$ , приведенной на рис. 3, следует, что для природного и синтетического кварца, облученного потоком  $5 \cdot 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup>, ангармонические поправки близки.

Таким образом, вклад электрооптической и механической ангармоничности позволяет объяснить аномальную температурную зависимость интенсивности КР, однако сами вклады трудно разделить.

В случае кварца, облученного гамма-нейтронными потоками, сравнение температурных зависимостей интенсивности, частоты и ширины линий в спектре КР приводит к выводу, что отклонение экспериментальной зависимости  $I(T)$  от теоретической (1) связано преимущественно с влиянием электрооптической ангармоничности. Действительно, механическая ангармоничность должна проявляться в изменении температурной зависимости частоты  $\nu(T)$  и ширины линии  $\delta(T)$  КР. Согласно результатам, полученным в работе [11], изменения  $\nu(T)$  и  $\delta(T)$  становятся заметными лишь при воздействии больших потоков быстрых нейтронов ( $> 10^{19}$  нейтрон/см<sup>2</sup>), когда кристаллическая решетка сильно деформирована и расширена в первую очередь за счет образования скоплений дефектов и аморфизованных областей.

Таким образом, поскольку аномальная температурная зависимость интенсивности КР наблюдается при воздействии сравнительно малых потоков ( $\sim 10^{18}$  нейтрон/см<sup>2</sup>), которые еще не изменяют температурного хода частоты и ширины линий КР, изменение температурной зависимости интенсивности КР может быть объяснено усилением электрооптической ангармоничности за счет образования точечных структурных дефектов непримесной природы и связанных с ними центров окраски.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Зубов В. Г., Захарова Е. К., Осипова Л. П., Кундикова Н. Д. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1976, 17, № 4, с. 475. [2] Зубов В. Г., Осипова Л. П. Кристаллография, 1977, 22, № 1, с. 110. [3] Осипова Л. П., Ивашкин Ю. А. ФТТ, 1981, 23, № 3, с. 919. [4] Зубов В. Г., Осипова Л. П., Кундикова Н. Д. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1976, 17, № 5, с. 628. [5] Mitchell W., Paidge E. J. Phil. Mag., 1956, 1, p. 1085. [6] Katz A. Philips Res. Reports, 1962, 17, p. 113. [7] Mitchell E. W., Rigden J. D. Phil. Mag., 1957, 2, p. 941. [8] Ельяшевич М. А. Атомная и молекулярная спектроскопия. М.: Гл. редакция физ.-мат. литературы, 1962. [9] O' Theimer. Canad. J. Phys., 1956, 34, p. 312. [10] Зубов В. Г., Осипова Л. П. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1976, 17, № 4, с. 493. [11] Зубов В. Г., Осипова Л. П., Кундикова Н. Д. Вестн. Моск. ун-та. Физ. Астрон., 1980, 21, № 3, с. 73.

Поступила в редакцию  
22.07.82

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1984, т. 25, № 1

УДК 539.12

### КЛАСТЕРНЫЕ ГИПЕРЯДРА

Н. Н. Колесников, В. А. Копылов, А. В. Колесов

(кафедра теоретической физики)

Как уже отмечалось ранее [1, 2], присутствие  $\Lambda$ -частицы усиливает тенденцию к кластеризации нуклонов в ядрах (см. также [3]), и в ряде случаев образование кластерных структур приводит к выигрышу энергии. Типичными представителями кластерных гиперядер являются  ${}^9_{\Lambda}\text{Be}(\alpha + \alpha + \Lambda)$  [1, 2, 4—6],  ${}^6_{\Lambda}\text{He}(\alpha + n + \Lambda)$  [7],  ${}^6_{\Lambda}\text{Li}(\alpha + p + \Lambda)$  и  ${}^7_{\Lambda}\text{Li}(\alpha + n + p + \Lambda$  или  $\alpha + d + \Lambda)$ , а двойных  $\Lambda$ -гиперядерных систем —  ${}^10_{\Lambda\Lambda}\text{Be}(\alpha + \alpha + \Lambda + \Lambda)$  [2, 4, 5] и  ${}^6_{\Lambda\Lambda}\text{He}(\alpha + \Lambda + \Lambda)$ . Кроме того, не исключена возможность существования квазимолекулярной слабо связанной системы  $d-\Lambda-d$  с параллельной ориентацией спинов дейтронов [2, 8]. Изучение таких систем, из которых некоторые находятся на пределе стабильности, совместно с другими гиперядрами позволило бы уточнить свойства  $\Lambda N$ - и  $\Lambda\Lambda$ -сил и некоторые вопросы структуры ядра и взаимодействия ядерных частиц. Анализ  $\Lambda\Lambda$ -взаимодействия и двойных кластерных гиперядер, проводившийся в [5], содержал значительную степень произвола, так как единственным ограничением для выбора параметров  $\Lambda-\alpha$ -потенциала было требование воспроизведения правильного значения энергии связи ( $B_{\Lambda}$ ) гиперядра  ${}^5_{\Lambda}\text{He}$ , но не согласование с другими гиперядерными данными. Не была достаточно полно исследована и квазимолекулярная система  $d-\Lambda-d$  [2].

В настоящей работе с  $\Lambda-N$ -потенциалами, согласованными с основными гиперядерными данными, были проведены расчеты кластерных гиперядерных систем  ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$  и  ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$  и проанализированы свойства  $\Lambda-\Lambda$ -сил, а также исследована стабильность гиперядерной системы  $d-\Lambda-d$ . Расчет гиперядер  ${}^9_{\Lambda}\text{Be}$  и  ${}^{10}_{\Lambda\Lambda}\text{Be}$  проводился с  $\Lambda-N$ -потенциалами гауссовской формы (варианты I—IV), согласованными с  $\Lambda-p$ -рассеянием и энергиями связи гиперядер  ${}^3_{\Lambda}\text{H}$ ,  ${}^5_{\Lambda}\text{He}$  и  ${}^{13}_{\Lambda}\text{C}$  [2].

Потенциал  $\Lambda-N$ -взаимодействия как в синглетном ( $s$ ), так и триплетном ( $t$ ) состояниях имеет вид

$$V_{\Lambda N}^{s,t}(r) = \sum_{i=1}^3 V_i^{s,t} \exp\left(-\frac{r^2}{(r_i^{s,t})^2}\right). \quad (1)$$