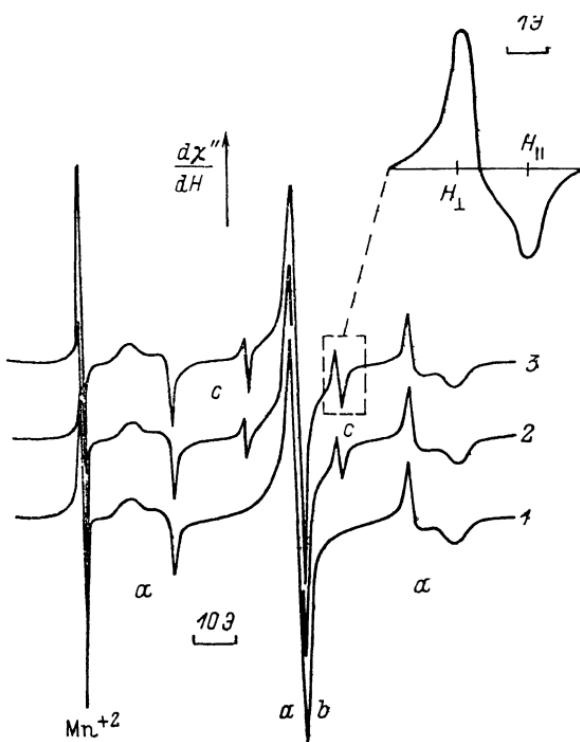


# ЭЛЕКТРОННЫЙ ПАРАМАГНИТНЫЙ РЕЗОНАНС ФОСФОРА В АЛМАЗЕ

Н. Д. Самсоненко, В. В. Токий, С. В. Горбань

Природа уникальных свойств алмаза — идеального ковалентного кристалла, наиболее твердого и наименее сжимаемого вещества в доступной нам части Вселенной, — все еще недостаточно ясна, и дальнейший прогресс в этой области исследований сдерживается ограниченностью экспериментальных данных [1]. Наиболее изученными примесными атомами в этом идеальном диамагнетике являются азот и бор с ковалентными атомными радиусами (КАР)  $r_N=0.074$  и  $r_B=0.081$  нм, близкими к КАР углерода



Спектры ЭПР порошков синтетических алмазов.

Содержание парамагнитных центров фосфора  $nP \cdot 10^{-10}$  (см $^{-3}$ ): 1 — 0, 2 — 1.8, 3 — 3.5.

$r_C=0.077$  нм. Данные по входению в кристаллическую решетку алмаза атома фосфора, имеющего на 43 % больший КАР ( $r_P=0.11$  нм), до настоящего исследования нам не известны. При такой деформации в алмазе должны возникать локальные давления величиной порядка модулей упругости (т. е. сотни ГПа).

Настоящая работа посвящена ЭПР-исследованиям алмазов, содержащих фосфор. Исследуемые образцы алмазов с различным содержанием фосфора были получены от сотрудников ИФВД АН СССР О. А. Воронова и А. В. Рахманиной и представляли собой порошки серо-голубого цвета, состоящие из монокристаллов и их друз, размерами от 1 до 50 мкм.

Исследования проводились на серийном ЭПР-спектрометре фирмы «Радиопан» ( $\lambda=3$  см) при температуре 300 К. Репером концентрации парамагнитных центров служил калибровочный образец для ЭПР-спектроскопии на основе двухвалентного марганца в окиси магния, аттестованный во ВНИИФТРИ. Концентрация парамагнитного фосфора определялась

методом интегральных площадей сравнением спектральных линий фосфора с линиями репера, помещаемого в резонатор вместе с исследуемыми образцами.

ЭПР-спектры изученных порошков алмаза представлены на рисунке. Спектр бесфосфорного синтетического алмаза представляет собой известный триплет азота (линия *a*). На центральную линию азота накладывается линия (*b*), обусловленная дефектами непримесного характера [2]. Однако на образцах с примесью фосфора в спектре ЭПР (кривые 2, 3) появляются две дополнительные четкие линии (*c*) на краях центральной линии азотного триплета с *g*-фактором, равным  $2.0025 \pm 0.0002$ . Изученная нами сверхтонкая структура спектра ЭПР парамагнитного фосфора в алмазе обусловлена взаимодействием неспаренного электрона с ядром фосфора. Такое сверхтонкое взаимодействие представляется оператором

$$\hat{H} = 2\mu_0\mu_I g_I \left\{ \frac{3(r\hat{S})(rI)}{r^5} - \frac{(\hat{S}I)}{r^3} \right\} + 2\mu_0\mu_I g_I \frac{8\pi}{3} \delta(r) \hat{S}I, \quad (1)$$

где  $\mu_0$  — магнетон Бора,  $\mu_I$  — ядерный магнетон,  $g_I$  — ядерный *g*-фактор,  $\hat{S}$  и  $\hat{I}$  — операторы электронного и ядерного спинов. Интегрируя по всем пространственным координатам, выражаем это взаимодействие как функцию только спиновых координат. Предполагая аксиальную симметрию электронной волновой функции и учитывая, что  $\langle x^2/r^5 \rangle = \langle y^2/r^5 \rangle$ , а перекрестные члены  $\langle xy/r^5 \rangle = 0$ , получим часть спинового гамильтонiana, описывающую сверхтонкое взаимодействие неспаренного электрона с ядром фосфора

$$W = (A + 2B) S_z I_z + (A - B)(S_x I_x + S_y I_y), \quad (2)$$

где *A* и *B* — константы изотропного и анизотропного сверхтонкого взаимодействия. Это уравнение в обозначениях работы [3] имеет вид

$$W = A_s S_z I_z + B_s (S_x I_x + S_y I_y), \quad (3)$$

откуда следует, что

$$A_s = A + 2B, \quad B_s = A - B. \quad (4)$$

В спиновый гамильтониан входит еще член, выражающий электронное зеемановское взаимодействие  $\mu_0 g \hat{S} H$ ; ядерным зеемановским членом ( $-\mu_I g_I \hat{I} H$ ) пренебрегаем. Считая *g*-фактор изотропным и энергию зеемановского электронного взаимодействия существенно большей других типов взаимодействия, а анизотропное сверхтонкое взаимодействие — много меньше изотропного, выбираем в качестве нулевого приближения изотропную часть гамильтониана, что позволяет квантовать  $\hat{S}$  и  $\hat{I}$  по внешнему магнитному полю *H* и затем рассматривать анизотропию как первый порядок теории возмущений. Это приводит к следующему уравнению для сверхтонких компонент с магнитным квантовым числом *M*<sub>*I*</sub>:

$$\hbar v(M_I) = \mu_0 g H + A M_I + B M_I (3 \cos^2 \theta_H - 1), \quad (5)$$

где  $\theta_H$  — угол между направлением магнитного поля и осью симметрии сверхтонкого взаимодействия,  $M_I = 1/2$  для ядер фосфора, и, следовательно, мультиплет ЭПР фосфора состоит из двух линий. При хаотической ориентации частиц порошка наблюдается спектр, являющийся суперпозицией спектров отдельных мелких монокристаллов. Результирующий спектр представлен на рисунке. Два резких пика производной линии поглощения парамагнитного фосфора соответствуют определенным ориентациям монокристаллов, а именно  $\theta_H = 0$  и  $\pi/2$ . Анализ результирующего спектра позволил определить константы сверхтонкого взаимодействия в уравнении (5)  $A = 20.8 \pm 0.2$ ,  $B = 1.2 \pm 0.2$  Э, из которых по формулам (4) получены константы  $A_s = 23.2 \pm 0.2$  и  $B_s = 19.6 \pm 0.2$  Э.

Сравнивая полученные нами константы с расчетами [4, 5] констант *A*\* и *B*\* для свободного атома фосфора, можно оценить вероятность пре-

бывания неспаренного электрона на  $3s$ - и  $3p$ -орбиталах фосфора соответственно как  $C_{3s}^2 = A/A^* = 20.8/3640 = 0.0057$ ,  $C_{3p}^2 = B/B^* = 1.2/103 = 0.0116$ . Следовательно, полную вероятность пребывания неспаренного электрона на атоме фосфора в алмазе можно оценить как  $C_{3s}^2 + C_{3p}^2 = 0.017$ . Аналогичная вероятность на азоте в алмазе составляет 0.29 [3]. Установление более детальных структурных особенностей вхождения фосфора в кристаллическую решетку алмаза потребует получения констант  $A$  и  $B$  на основе теоретических моделей кристалла и сравнения их с экспериментальными.

### Список литературы

- [1] Александров И. В., Гончаров А. Ф., Зисман А. Н., Стишов С. М. // ЖЭТФ. 1987. Т. 93. № 2(8). С. 680—691.
- [2] Самсоненко Н. Д., Соболев Е. В. // Письма в ЖЭТФ. 1967. Т. 5. № 9. С. 304—306.
- [3] Smith W. V., Sorokin P. P., Gelles I. L., Lasher G. S. // Phys. Rev. 1959. V. 115. N 6. P. 1546—1552.
- [4] Watson R. E., Freeman A. J. // Phys. Rev. 1961. V. 123. P. 521—528.
- [5] Эткис П., Саймонс М. Спектры ЭПР и строение неорганических радикалов. М.: Мир, 1970. 306 с.

Макеевский инженерно-строительный институт

Поступило в Редакцию  
25 марта 1991 г.

---

© Физика твердого тела, том 33, № 8, 1991  
Solid State Physics, vol. 33, N 8, 1991

## ОРИЕНТАЦИОННЫЙ МАГНИТООПТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ В НИТЕВИДНЫХ МОНОКРИСТАЛЛАХ ЖЕЛЕЗА

B. E. Зубов, Г. С. Кринчик, С. Н. Кузьменко

В работе [1] была измерена спектральная зависимость четного по на магниченности ориентационного магнитооптического эффекта (ОМЭ) в же лезе в ближней инфракрасной области спектра. При исследовании  $180^\circ$  доменных границ (ДГ) в монокристаллах железа при нормальном падении света наблюдался большой эффект, который был интерпретирован как ОМЭ [2]. Однако последующее изучение этого эффекта показало, что он имеет необычные поляризационные свойства, противоречащие этой про стейшей интерпретации. В настоящей работе приводятся результаты иссле дования поляризационных свойств указанного эффекта, наблюдающегося при колебаниях  $180^\circ$  и  $90^\circ$  ДГ, а также сообщается об измерении истинного ОМЭ на монокристаллах железа в видимой области спектра.

Исследования проводились на нитевидных монокристаллах железа квадратного сечения со стороной  $t=30\text{--}150$  мкм и длиной несколько мм с оптически совершенными гранями типа (100). Доменная структура образцов визуализировалась с использованием меридианального эффекта Керра в установке, собранной на базе микроскопа МБС-10. Образцы, как правило, имели одну  $180^\circ$  ДГ, расположенную в центре вдоль оси кри сталлов, которая могла прерываться ромбовидными доменами с намагниченностью в них, направленной перпендикулярно указанной оси. Схематически доменная структура и используемые системы координат показаны на рис. 1. Измерения производились с помощью высокочувствительного магнитооптического микромагнетометра, созданного на базе металлографического микроскопа МИМ-8 и описанного в [3]. Числовая апертура использованного иммерсионного объектива составляла 1.25.

На рис. 2 представлены результаты измерения указанного необычного эффекта при нормальном падении света для двух поляризаций: 1) вектор