

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 535.324+535.341-15

ОПТИЧЕСКИЕ ПОСТОЯННЫЕ Fe_2O_3
В ИНФРАКРАСНОЙ ОБЛАСТИ СПЕКТРА

С. И. Попова, Т. С. Толстых и Л. С. Ивлев

Спектры оптических характеристик гематита Fe_2O_3 представляют интерес как для приложений в структурной химии и минералогии, так и для расчета оптических характеристик атмосферного аэрозоля, в состав которого входят окислы железа [1]. До настоящего времени в литературе имеются данные по спектрам пропускания порошков гематита, нанесенных на подложку [2] и пресованных с КВг [3, 4]. Однако данные работ [2-4] сильно различаются между собой даже по положению полос поглощения в спектре. Отдельные измерения показателей преломления $n(\nu)$ и поглощения $k(\nu)$ имеются в видимой области [5, 6]. Спектры же оптических постоянных в инфракрасной области вообще отсутствуют. В связи с этим данная работа поставлена с целью определения $n(\nu)$ и $k(\nu)$ гематита в ИК области спектра.

В работе изучены два образца Fe_2O_3 : монокристалл гематита ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) и образец, который имел вид плотно упакованного однородного вещества. Исследование дифрагированного рентгеновского спектра второго образца показало, что Fe_2O_3 находится в аморфном состоянии. При химическом анализе кристаллического гематита (аморфного Fe_2O_3) обнаружено не более 0.3 вес. % (4%) FeO и около 0.05% (1%) Ba, Ni, Al, Si, Ca.

Оптические постоянные рассчитывались методом Крамерса—Кронига по измеренному спектру отражения $R(\nu)$ ¹ (рис. 1, 2).

Спектры отражения Fe_2O_3 в области 4000—200 см^{-1} измерялись в поляризованном свете на спектофотометре Хитачи-225, причем для кристалла гематита отражение происходило от плоскости, вырезанной параллельно оптической оси. Для измерения спектров обыкновенного и необыкновенного лучей образец устанавливался так, что оптическая ось направлена по колебаниям электрического вектора падающего света.

Рис. 1. Спектры коэффициента отражения и оптических постоянных кристаллического гематита. а — обыкновенный луч, б — необыкновенный луч.

кристалла совпадала или была перпендикулярна кристальному вектору падающего света.

Погрешность в определении $R(\nu)$ в области значений коэффициентов отражения 0.5—80% не превышала 1%. Это достигалось применением набора эталонов сравнения (Al, Ge, KRS-5, AgCl) и устранением собственного излучения образца и рассеянного света.

¹ В данной работе, так же как и в [7], использовалась методика проведения расчетов, разработанная Л. И. Альперовичем. Подробные алгоритмы будут опубликованы в издании ТГУ.

При расчете $n(\nu)$ и $k(\nu)$ методом Крамера—Кронига интегрирование проводилось в области $200 \div 16\,000 \text{ см}^{-1}$. В области $4000 \div 16\,000 \text{ см}^{-1}$ значения $R(\nu)$ определялись интерполяцией между рассчитанными значениями $R(\nu)$ в видимой области и измеренными при $\nu = 4000 \text{ см}^{-1}$. Оптические постоянные кристаллического гематита и аморфного Fe_2O_3 показаны на рис. 1, а, б и 2 соответственно. Сравнение спектров показателей поглощения $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$ со спектром порошка гематита, запрессованного в КВг [3], показывает, что приведенные в работе [3] полосы поглощения в области 525 и 310 см^{-1} присутствуют в спектре обыкновенного и необыкновенного лучей, а полоса 436 см^{-1} проявляется только в спектре поглощения обыкновенного луча. Обнаруженная в работе [3] полоса поглощения с максимумом 391 см^{-1} у нас отсутствует и является, вероятно, следствием усреднения поглощения обыкновенного и необыкновенного лучей в порошке. Для аморфного Fe_2O_3 наблюдается совпадение максимума поглощения в области 950 см^{-1} (рис. 2) с данными работы [2]. Следовательно, различие спектров пропускания Fe_2O_3 , по данным работ [2, 3], можно отнести за счет того, что в работе [3] исследовался $\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$, а в работе [2] — аморфный Fe_2O_3 .

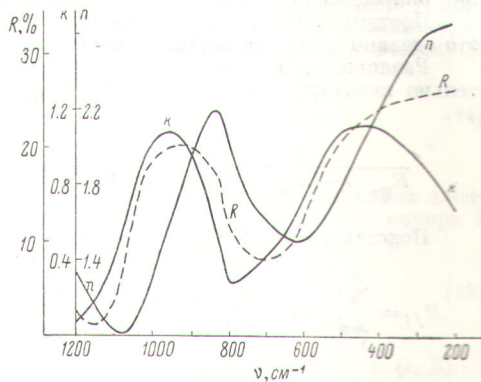


Рис. 2. Спектры $R(\nu)$ и оптических постоянных аморфного Fe_2O_3 .

В заключение выражаем глубокую благодарность Л. И. Альперовичу за внимание и интерес к работе и В. М. Золотареву за ценные советы и содействие при проведении эксперимента.

Литература

- [1] Х. Юнге. Химический состав и радиоактивность атмосферы. Изд. «Мир», М., 1965; Р. Кейдл. Твердые частицы в атмосфере и космосе. Изд. «Мир», 1965.
- [2] J. M. Hunt, M. P. Wisher. *Anal. Chem.*, **22**, 1478, 1950.
- [3] Н. С. Liese. *Am. Min.*, **52**, 1198, 1967.
- [4] С. М. Ария, М. В. Голомзина. *ФТТ*, **4**, 2921, 1962.
- [5] А. Н. Винчелл, Г. Винчелл. Оптические свойства искусственных минералов. Изд. «Мир», М., 1967.
- [6] P. C. Baileу. *J. Appl. Phys.*, **31**, 398, 1960.
- [7] С. И. Попова, Т. С. Толстых, В. Р. Воробьев. *Опт. и спектр.*, **33**, 801, 1972.

Поступило в Редакцию 25 октября 1971 г.

УДК 539.194

ФОРМУЛЫ ДЛЯ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ДВУХФОТОННЫХ ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ПЕРЕХОДОВ

М. В. Приютов и С. К. Потанов

Двухфотонное поглощение лазерного излучения обычно происходит на вибронные уровни молекул. Поэтому весьма актуальным представляется вопрос о теоретическом анализе вибрационной структуры полосы поглощения.

В работе [1] такой анализ произведен на основе общей формулы для вероятности двухфотонного процесса

$$W_{fi} = \frac{2\pi e^4}{\hbar} |R_{fi}|^2, \quad (1)$$

где

$$R_{fi} = \sum_{m, v''} \frac{\langle f, v' | \epsilon r | m, v'' \rangle \langle m, v'' | \epsilon r | i, v \rangle}{E_{m, v''} - E_{i, v} - \hbar\omega}. \quad (2)$$

Здесь i, f , и m — индексы начального, конечного и промежуточного электронных состояний, а v, v' и v'' — наборы колебательных квантовых чисел в этих состояниях, ϵ — вектор поляризации фотона.