

# Fortgeschrittenenpraktikum FU-Berlin

## Versuch B6 - Optische Messungen an einem Isolatorkristall

Martin Kavalar (kavalar@gmail.com)  
Erik Streb (mail@erikstreb.de)

26. September 2007

### Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Grundlagen</b>	<b>1</b>
2.1	Die Hundschen Regeln . . . . .	1
2.2	Ligandenfeldtheorie . . . . .	2
2.3	Rubin . . . . .	2
<b>3</b>	<b>Versuchsaufbau</b>	<b>4</b>

## 1 Einleitung

Im folgenden Versuch werden wir Rubin mit Hilfe von Optischen Messungen untersuchen. Rubin besteht hauptsächlich aus Korund  $Al_2O_3$ , was ein farbloses Material ist. Erst die Dotierung mit Cr-Ionen, die die Al-Plätze besetzen, entsteht die rote Färbung. Diese wollen wir im Versuch verstehen und erklären können.

## 2 Theoretische Grundlagen

### 2.1 Die Hundschen Regeln

Die Besetzung der Orbitale im Rubin erfolgt nach den Hundschen Regeln:

- Volle Schalen oder Unterschalen haben Gesamt-Drehimpuls und Gesamtspin null.
- Der Gesamtspin nimmt den maximal möglichen Wert an, d.h. die Spins der einzelnen Elektronen stehen möglichst parallel

- Der Gesamt-Bahndrehimpuls  $M$  soll maximal werden
- Der Gesamt-Drehimpuls ist  $J = L - S$  falls die Schale weniger als halb gefüllt ist und  $L + S$  falls die Schale mehr als halb gefüllt ist

In Molekülen entstehen Orbitale, die nach den Hundschen Regeln besetzt werden. Bei Ionischen Bindungen entsteht ein Kristallfeld.

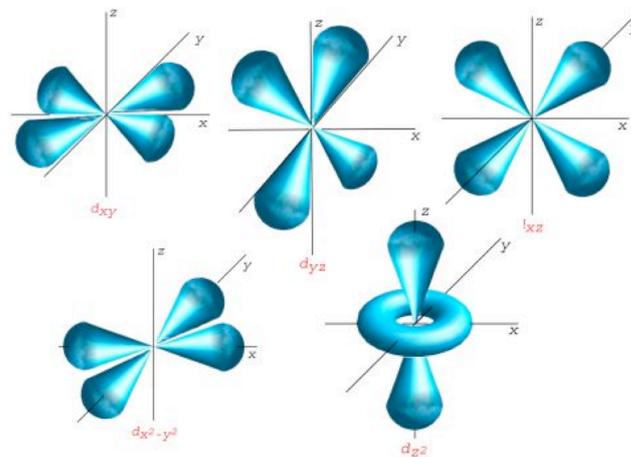
## 2.2 Ligandenfeldtheorie

Mit der 1930 von John H. van Vleck und Hans Bethe entwickelten Ligandenfeldtheorie lässt sich das bei Rubin unerwartete optische Verhalten erklären. Normalerweise sind im Grundzustand die höchsten besetzten Orbitale des Ions entartet, und man würde somit im Spektrum der optischen Übergänge nur eine charakteristische Linie beobachten können.

Befindet sich das Ion in einem Kristall, kommt es in Abhängigkeit von der Symmetrie des Kristalls zur Aufhebung dieser Entartung.

Bei Rubin haben wir es mit d-Orbitalen in einer rhomboedrischen Struktur zu tun.

Man würde bei der Dotierung mit Chrom-Ionen eigentlich eine grüne Färbung erwarten. Die Liganden (allgemein: Umgebende Atome oder Moleküle) nähern sich dem Zentrum unterschiedlich stark an. Dadurch wird die Energie je nach Ladung der Liganden erhöht oder erniedrigt und hebt somit die Entartung der d-Orbitale mehrfach auf.



**d-Orbitale**

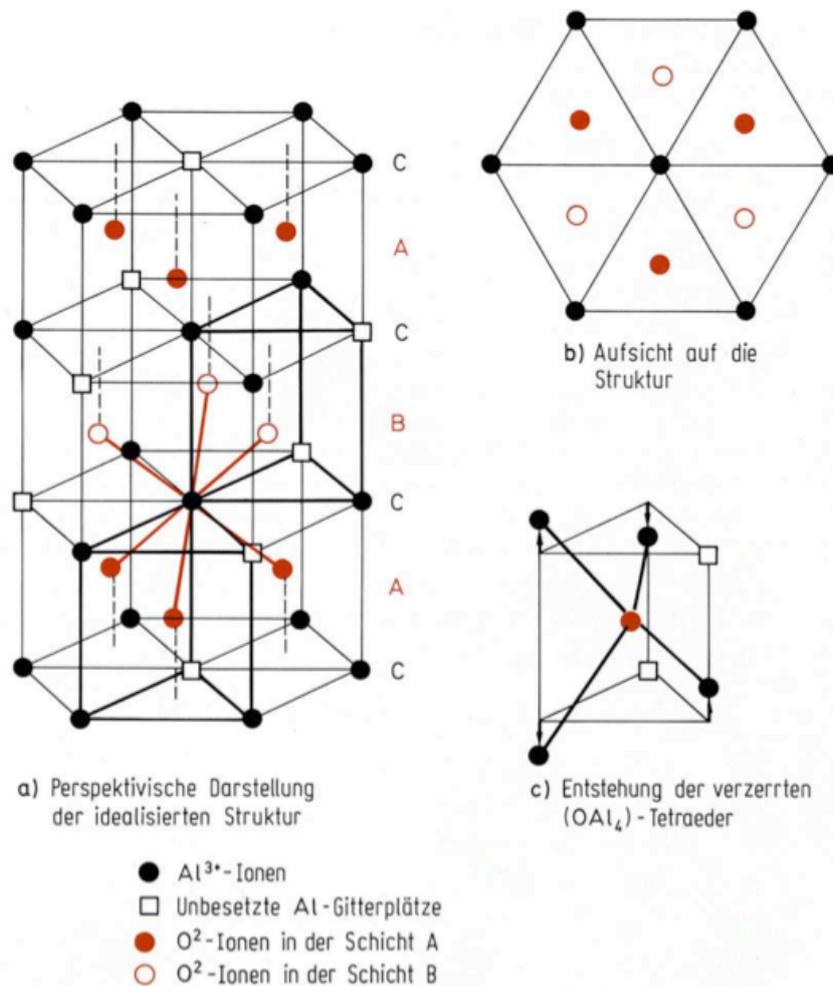
## 2.3 Rubin

Die Sauerstoffatome sind in der hexagonal-dichtesten Kugelpackung angeordnet, zwischen denen sich eine Schicht Aluminium befindet. In dieser Al-Schicht ist jeder dritte Platz unbesetzt.

Die Dotierung mit den dreifach positiv geladenen Chrom-Ionen ( $Cr^{3+}$ ) liegt von der Grössenordnung bei einigen Prozent. Die Elektronenkonfiguration des Chrom-Ions ist  $[Ar]3d^3$ , es besitzt also zwei leere d-Orbitale und drei halbgefüllte Orbitale.

Das Kristallfeld kann als kubisches Feld mit einer schwachen trigonalen Ausprägung betrachtet werden. Die d-Orbitale sind somit Mischzustände. Dieser trigonale Anteil führt zu einer Verbreiterung der Spektrallinie.

Ein Chrom-Ion befindet sich im Zentrum eines verzerrten Sauerstoff-Oktaeders ( $d^2sp^3$  hybridisiert). Die angeregten Zustände des Rubins werden als  ${}^2E$ ,  $4_2^T$  und  $4_1^T$  bezeichnet. Die Auswahlregel verbietet einen Übergang vom Grundzustand in den  ${}^2E$  Zustand.

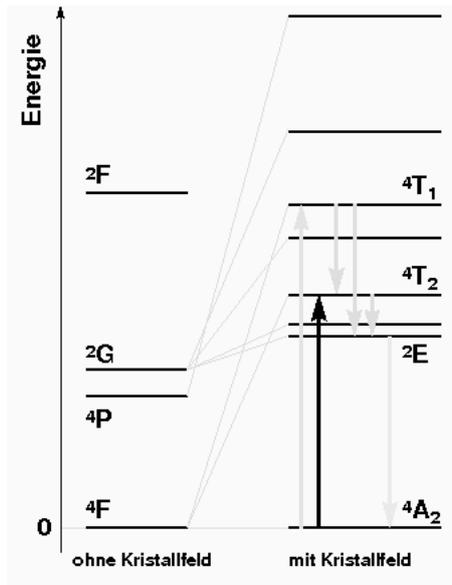


### Struktur von Rubin

Durchdringt also weißes Licht den Rubin, verliert es seine gelbgrüne und violette Farbkomponente in großen Teilen, während der rote Teil ungehin-

dert die Kristallstruktur passieren kann.

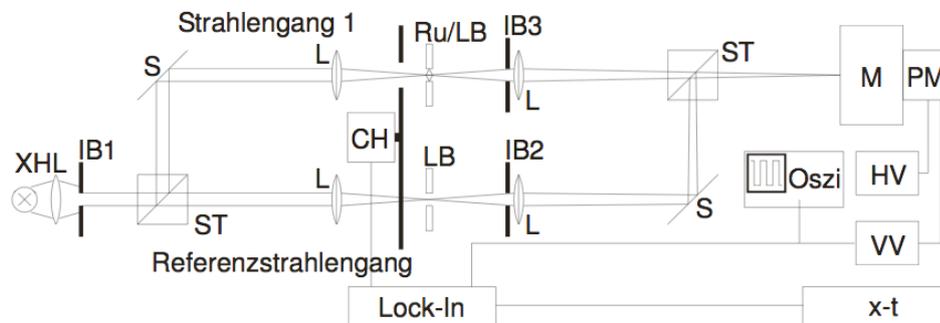
In einem Tanabe-Sugano-Diagramm wird die Energie der verschiedenen spektroskopischen Terme über die Größe des Ligandenfelds aufgetragen. Als Einheit verwendet man den Racah Parameter B, welcher ein Maß für die Elektronenwechselwirkung ist.



Termschema von Rubin

### 3 Versuchsaufbau

Im folgender Abbildung ist das Zweistrahl-Absorptionsspektrometer dargestellt. Das Licht einer Xenon-Hochdrucklampe trifft nach Aufspaltung und fokussierung auf den Rubin. Im Sekundärelektronenvervielfacher wird das Licht registriert.



XHL - Xe-Hochdrucklampe + Kondensor  
 IB - Irisblenden  
 ST - Strahlteiler  
 S - Spiegel  
 L - Linsen (f=10 cm Achromaten)  
 CH - Chopper  
 Ru/LB - Rubin-Probe oder Lochblende  
 LB - Lochblende

M - Monochromator mit Elektromotor  
 PM - Photomultiplier  
 HV - Hochspannungsnetzgerät  
 VV - Vorverstärker  
 Lock-In-Verstärker  
 x-t-Schreiber  
 Oszilloskop

### Versuchsaufbau