

## Лабораторна робота № 4

### ДОСЛІДЖЕННЯ ЦЕНТРІВ ЗАБАРВЛЕННЯ В ЛУЖНО-ГАЛОЇДНИХ КРИСТАЛАХ

#### Мета роботи:

1. Дослідити оптичні властивості центрів забарвлення в іонних кристалах.
2. Познайомитися з принципом дії Shumadzu UV-1800 та методами роботи на ньому.

#### Обладнання:

спектрофотометр Shumadzu UV-1800, опромінені кристали KCl, NaCl, KBr, LiF.

#### Загальні відомості.

Чисті кристали галогенідів лужних металів прозорі у видимій області спектра. Однак, якщо чистий лужно-галоїдний кристал нагрівати в парі одного з складових його елементів (металу: Na, K, Li,...) або опромінювати рентгенівськими променями спостерігається фарбування, видиме неозброєним оком. Якщо кристал хлористого натрію нагрівати в присутності парів натрію, то він набуде жовтого кольору; хлористий калій, нагріти в парах калію - стає фіолетовим, KBr - блакитний. Викликати забарвлення можна також опроміненням  $\gamma$  - променями або нейтронами.

Центр забарвлення – дефект кристалічної ґратки, який поглинає світло. Найпростішим видом центрів забарвлення є так звані F-центри. Назва «F центр» походить від німецького слова «farbe»- фарба.

При ретельному вивченні спектрів поглинання забарвлених кристалів вдалося виявити широку полосу поглинання так звану F-полосу. F-центр, складається з аніонної вакансії, яка, діючи як ефективний позитивний заряд, утримує при собі вільний електрон, що поставляється, наприклад, надмірним атомом лужного металу в результаті його іонізації, ж введенням в ґратку домішковим атомом (рис. 1). Також електрон може стати вільним при поглинанні зовнішнього електромагнітного опромінення.

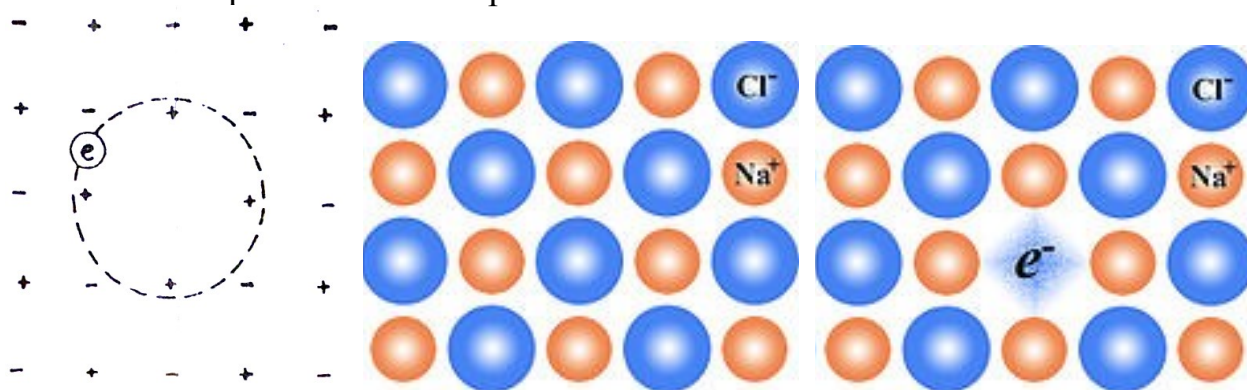


Рис.1. Схематичне зображення F-центру у NaCl.

Таке припущення про F- центри підтверджується цілим рядом фактів :

1. Полоса поглинання, обумовлена наявністю «F- центрів», не залежить від того, яким способом проведено забарвлення кристалу, нагріванням в парі металу або опромінюванням.
2. Забарвлені кристали мають меншу пікнометричну густину, ніж незабарвлені .

3. Кристали, що містять F -центри можуть знебарвлюватися під дією світла, довжина хвилі якого відповідає максимуму F-полоси. Тобто у всіх кристалах F-центри мають одну і ту ж природу.

Окрім «F - центрів» кристали можуть мати багато інших центрів забарвлення. Наприклад, вакантна позиція додатньо зарядженого іону притягує до себе дірку електрона та утворює «V- центр».

Для вивчення природи центрів забарвлення велике значення має дослідження процесу їх термічного відпалу. В результаті відпалу також відбувається знебарвлення кристалу.

Дослідження спектрів поглинання забарвлених кристалів проводиться за допомогою спектрофотометра Shumadzu UV -1800.

#### Спектрофотометра Shumadzu UV-1800

Спектрофотометр Shumadzu UV-1800 дозволяє працювати в наступних режимах:

- спектральний - сканування по довжині хвилі з можливістю подальшої обробки спектра (визначення положення максимумів і мінімумів, арифметичні операції, розрахунок площі, згладжування);
- фотометричний - вимірювання оптичної густини або пропускання на одній або декількох (до 8) обраних довжинах хвиль;
- кінетичний - реєстрація зміни поглинання, пропускання або енергії в часі.

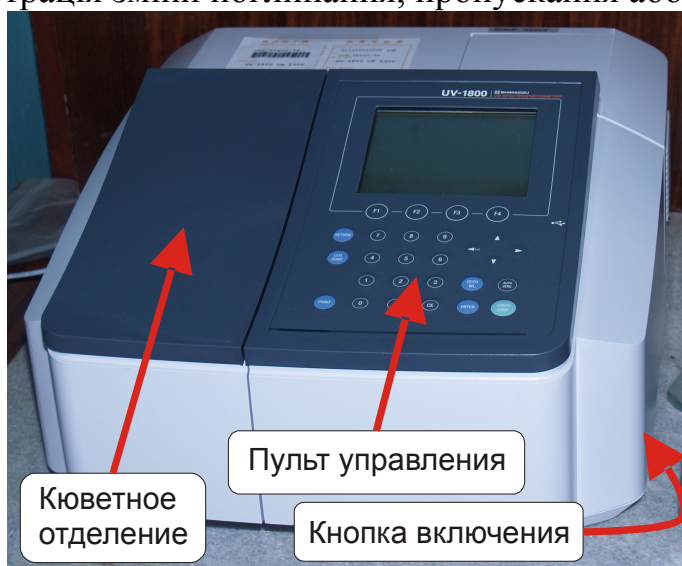


Рис. 2. Зовнішній вигляд спектрофотометру Shumadzu UV-1800.

Управління приладом можливо двома способами:

- 1) з використанням пульта управління (рис.2.);
- 2) з використанням комп'ютера.

У більшості випадків управління з використанням комп'ютера краще, тому цей спосіб і буде використовуватися в роботі.

#### Порядок роботи на спектрофотометрі Shumadzu UV -1800:

1. Увімкніть комп'ютер. Дочекайтеся завантаження операційної системи. Візуально перевірте наявність підключення приладу до комп'ютера кабелем USB.
2. Увімкніть прилад (справа внизу, рис.2.). Зачекайте ~2 хв поки пройде автоматична перевірка стану. Усі 10 параметрів повинні мати статус «ОК ». У відповідь на запит пароля натисніть на пульті управління «Enter». Виберіть

управління з комп'ютера «PC Ctrl» (клавiша F4 ). Далі управління приладом здійснюється з комп'ютера за допомогою програми UVProbe (на пульті управління більше нічого не натискайте).

3. Запустіть програму UVProbe (рис. 3). Побудову спектральної кривої проходження виконує спектральний модуль програми.

4. Виберіть Window > Spectrum.

5. Натисніть на панелі керування клавiшу Connect для з'єднання з приладом .

6. Підготовка до сканування спектру. Для того щоб прирівняти фон до нуля у всьому обраному діапазоні довжин хвиль необхідно виконати корекцію базової лінії. Перед початком корекції переконайтесь, що зразок невстановлений.

а) Натисніть на панелі керування приладом кнопку Baseline, щоб ініціювати операцію корекції.

б) Після появи діалогового вікна Параметри базової лінії введіть 800 і 300 це початок і кінець діапазону довжин хвиль.

Увага! Стартова довжина хвилі (Початок) повинна бути більше кінцевої!

в) Натисніть ОК. При процедурі корекції базової лінії змінюються показання у вікні «Статус приладу».

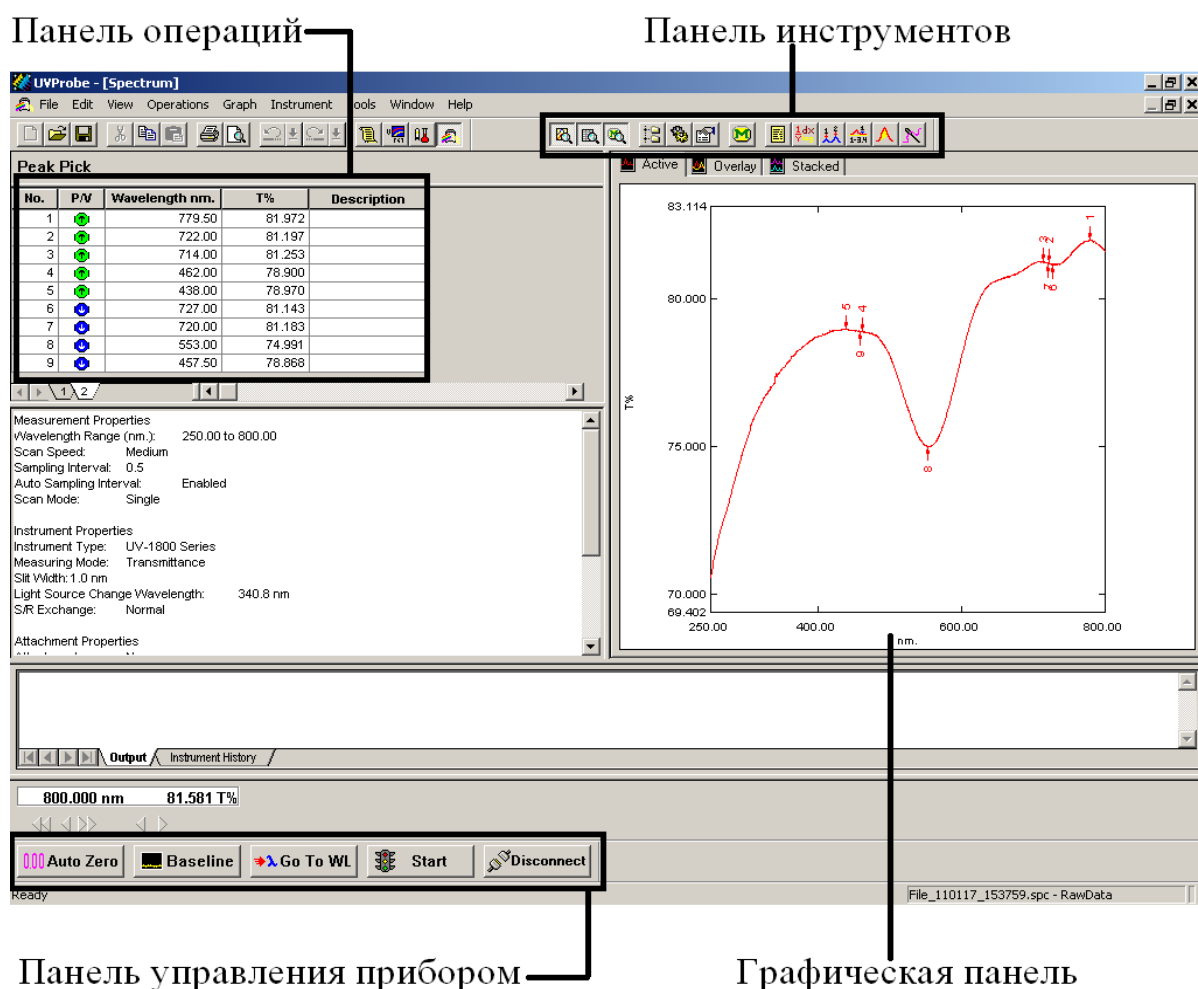


Рис.3. Запуск програми UVProbe.

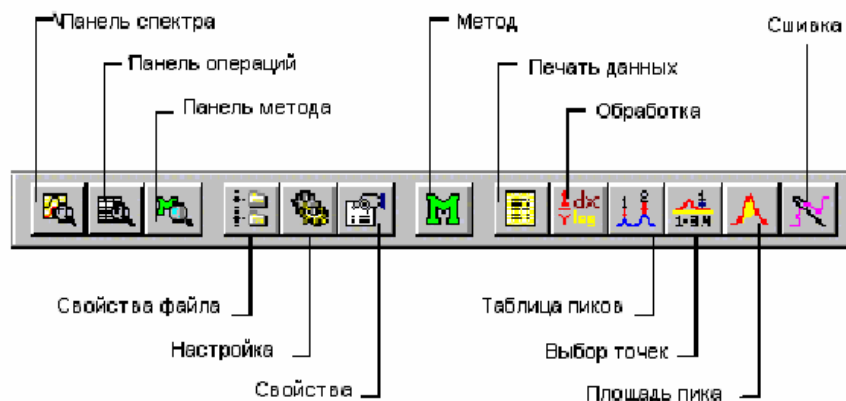


Рис.4. Панель інструментів

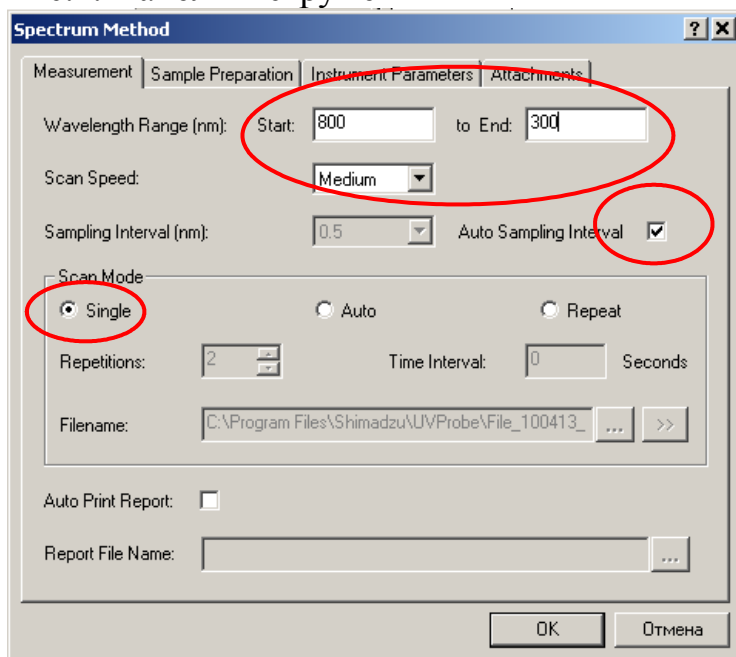


Рис. 5. Діалогове вікно «Спектральний метод».

7. Помістіть зразок у кюветне відділення приладу.

а) для вибору методу сканування виберіть Edit> Method або натисніть на значок Метод, з'явиться діалогове вікно «Спектральний метод» (рис. 5).

б) Введіть 800 в Start і 300 в End.

*Увага! Стартова довжина хвилі повинна бути більше кінцевої!*

в) Виберіть швидкість сканування (Scan speed) - "Medium".

г) Виберіть автоматичний інтервал виміру (Auto sampling interval).

д) Виберіть одноразове сканування (Scan mode - Single).

е) Натисніть вкладку Параметри приладу (Instrument Parameters) - з'явиться наступне діалогове вікно (рис.6.)

ж) Виберіть Проходження (Transmittance) у рядку Режим вимірювання (Measuring Mode).

Всі інші установки методу залиште за замовчуванням.

з) Натисніть ОК для установки параметрів приладу.

8. Виконання сканування спектру.

а) Натисніть Start на панелі керування приладом.

б) Після завершення сканування натисніть на графічній панелі вкладку «Active».

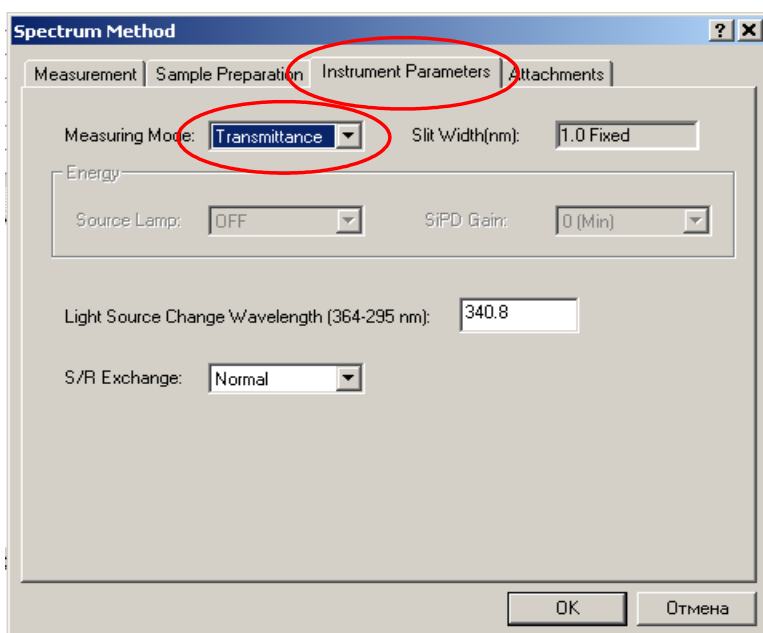


Рис. 6. Діалогове вікно параметри приладу (Instrument Parameters).

#### 9. Пошук піків.

Виберіть Operations> Peak Pick.

10. Роздрукуйте результати.

Натисніть правою клавішею миші на панелі операцій. Виберіть «Print» (рис. 7) (на панелі операцій).

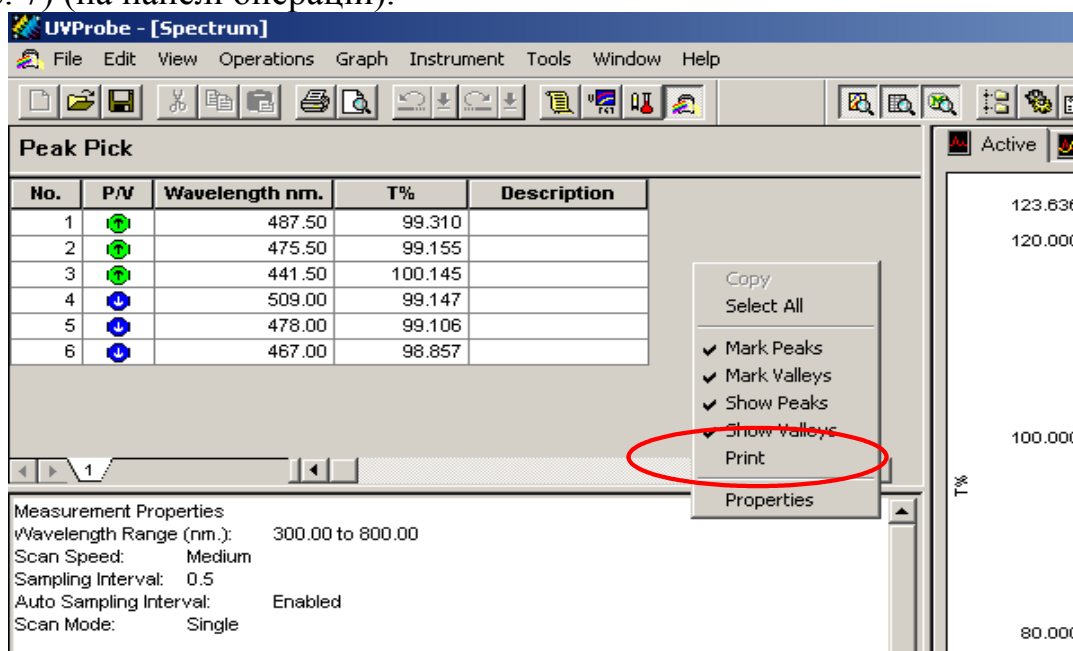


Рис. 7.

Натисніть правою клавішею миші на графічній панелі «customire» та встановіть максимальну товщину лінії (рис. 8)

Для сканування інших зразків повторіть дії пунктів 7 - 10, встановлюючи по черзі зразки в кюветное відділення.

Після закінчення роботи натисніть на панелі керування приладом «Disconnect». Після цього прилад можна вимкнути.

**Порядок виконання роботи.**

1. Добитися забарвлення кристалів KCl, NaCl, KBr, LiF, опромінюючи їх рентгенівськими променями. Час опромінення 4-7 годин.

2. Вивчивши залежність оптичної густини зразка від довжини хвилі, знайти полосу поглинання F-центрів і енергію основного рівня електрона.

3. Дані занести в таблицю.

Кристал	$\lambda$ , нм	E, eV	Забарвлення кристалу після опромінення рентгеном
KCl			
NaCl			
KBr			
LiF			

### Звіт

Звіт про виконану роботу повинен вміщувати:

1. Графік залежності коефіцієнта пропускання для всіх зразків, які містять «F-центри», від довжини хвилі світла, яке проходить через ці зразки.

2. Заповнена таблиця.

#### Контрольні питання.

1. Що таке F-центри?

2 Чому ми спостерігаємо різне забарвлення лужно-галоїдних кристалів після опромінення рентгеном?

3. Чому при відпалі F-центри руйнуються?

#### Література.

1. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела – М. Наука 1978.

2. Мотт и Генри. – «Электрические процессы в ионных кристаллах».

3. Описание прибора Shimadzu UV-1800.