

УДК 538.245:537.226.1

**И.И. МАКОЕД, И.Н. МЕЛЬНИКОВА, М.В. ЯРМОЛИЧ,
А.М. ПАНАСЕВИЧ**

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РЕШЕТОЧНЫХ СПЕКТРОВ ИОННЫХ КРИСТАЛЛОВ

Одним из методов неразрушающего контроля физических свойств веществ является метод диэлектрической спектроскопии. Исследование диэлектрического отклика относится к числу важных экспериментальных методов изучения динамических свойств кристаллов. Его практической реализацией являются радиочастотные, оптические и СВЧ-измерения, инфракрасная спектроскопия. Выраженный в виде функций компонент $\varepsilon_1(\omega)$, $\varepsilon_2(\omega)$ комплексной диэлектрической проницаемости $\varepsilon^* = \varepsilon_1 - i\varepsilon_2$, оптических констант $n(\omega)$, $k(\omega)$, он содержит сведения о механизмах диэлектрической поляризации и позволяет определять величины вкладов в ε^* , дает возможность получения частот оптических фононов, эффективных зарядов, электронных поляризуемостей.

Целью работы является разработка и применение методов диэлектрической спектроскопии для исследования диэлектрических функций ионных кристаллов.

В настоящее время диэлектрический формализм ИК диапазона развит в меньшей мере, чем ультрафиолетового и видимого участков спектра электромагнитных волн. Для последних разработаны методы надежного расчета диэлектрических функций, опирающиеся на результаты теоретического расчета зонной структуры, и получен обширный экспериментальный материал. В связи с этим, актуальным является построение моделей, отражающих процессы, происходящие при взаимодействии электромагнитного излучения с ионным кристаллом в ИК диапазоне. Перспективным для изучения наблюдаемых при этом явлений, представляется метод расчета диэлектрических спектров в модели квазигармонических осцилляторов, максимально учитывающей особенности кристаллического строения изучаемых систем, тип химической связи в решетке, межионные расстояния, массу, валентность и поляризуемость ионов.

В работе с помощью математического моделирования исследованы пути решения проблемы обнаружения и идентификации колебательных состояний веществ по ИК спектрам внешнего отражения. Проблема обнаружения и идентификации малоинтенсивных селективных полос поглощения в спектрах до настоящего времени остается актуальной. Одним из возможных путей ее решения, является дифференцирование экспериментальных

спектров коэффициента отражения $R(\omega)$. Это позволяет увеличить разрешение спектральных полос, которые перекрываются в исходных спектрах. Современное программное обеспечение дает возможность достаточно легко получать дифференциальные спектры, используя метод численного дифференцирования. В работе с этой целью применяли программу ORIGIN.

Полученные спектры обладают рядом свойств, выгодно отличающих их от исходных данных. В частности, при дифференцировании точки перегиба исходной функции превращаются в экстремумы, а экстремумы – в нули графика следующей производной. Уменьшение полуширины пиков в четных производных позволяет выявить тонкую структуру спектра. В нечетных производных абсциссе, соответствующей максимуму моды $R(\omega)$, отвечают нулевые значения производных.

В процессе получения экспериментальных спектров коэффициента отражения неизбежны погрешности, обусловленные как используемыми приборами, так и ошибками экспериментатора – неточности в определении абсолютных величин коэффициента отражения, скачки на краях шкалы многопредельных приборов, а также, неоднородности, возникающие при сшивании результатов, полученных на разных приборах.

Подобные ошибки при обработке спектров как по методу Крамерса Кронига, так и при получении дифференциальных спектров, могут привести к появлению особенностей в спектрах компонент диэлектрической проницаемости обусловленных не природой исследуемого материала, а математической обработкой. Поэтому предлагается предварительно выполнить осцилляторное моделирование спектра коэффициента отражения с целью получения функциональной зависимости $R(\omega)$, максимально близкой к экспериментальной. Для этого удобно использовать программу Reffit [1], которая позволяет с высокой степенью точности воспроизводить решеточные спектры ионных кристаллов. С использованием программы Reffit на основании восстановленных параметров осцилляторов выполнено моделирование решеточного спектра коэффициента отражения феррита висмута. С использованием дифференциальной спектроскопии восстановлены основные параметры оптических функций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Kuzmenko, A.B. Kramers-Kronig-constrained variational analysis of optical data / A.B. Kuzmenko // Rev. Sci. Instrum. – 2005. – Vol. 76. – P. 083108–083112.