

Eine „fehlende“ Gitterschwingung in Pyrit – beobachtet mit Hilfe der ATR-Methode

M. Behmer*

Institut für Mineralogie und Kristallographie
der Universität Wien

Z. Naturforsch. **39a**, 1293–1294 (1984);
eingegangen am 6. Oktober 1984

*Observation of a “missing” mode in pyrite
by the ATR-method*

The present work reports the observation of one of the two “missing” modes in FeS_2 (pyrite) by means of the ATR(attenuated total reflection)-method as a supplement to a paper by Lutz, Kliche, and Haeuseler (1981). The two highest polariton dispersion branches $\omega = \omega(k)$ have also been measured with this technique.

Die in [1] getroffene Festlegung der transversalen Eigenfrequenz der obersten infrarotaktiven Gitterschwingung in FeS_2 (Pyrit), mit $\omega_{\text{TO}} = 433 \text{ cm}^{-1}$ durch das Transmissionsspektrum, konnte durch Messung von Reflexionsspektren mit Hilfe der ATR-Methode bestätigt werden. Es wurden für diese Mode folgende Frequenzen erhalten:

$$\omega_{\text{TO}} = (433 \pm 3) \text{ cm}^{-1},$$

$$\omega_{\text{LO}} = (440 \pm 3) \text{ cm}^{-1}.$$

Für den darunterliegenden Oszillator ergab sich für ω_{LO} der Wert von $(432 \pm 3) \text{ cm}^{-1}$. In Abbildung 1 ist jene Situation dargestellt bei der im Experiment erstmals die oberste infrarotaktive Gitterschwingung zu beobachten war.

Die Verwendung der ATR-Methode zur Messung der Dispersionskurven von Volumenpolaritonen ist in [2–5] gut beschrieben. Eine Darstellung der Methode selbst findet man in [6]. Um die Dispersionszweige der Volumenpolaritonen zu ermitteln ist es notwendig, die Wendepunkte der Reststrahlenbanden zu bestimmen. Die gefundenen Frequenzen ω wurden in

$$k = (\omega/c) n \sin \alpha$$

eingesetzt und so die in Abb. 2 dargestellten Dispersionskurven erhalten, wobei α der Einfallswinkel des infraroten Lichtes ist, n der

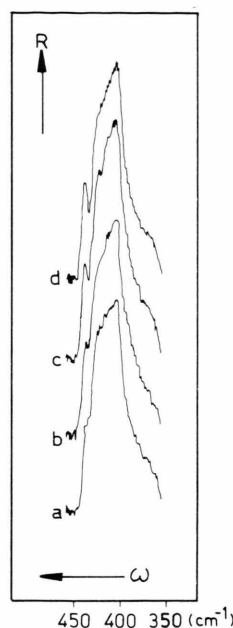


Abb. 1. Mit Hilfe der ATR-Methode, in TM-Geometrie, und KRS-5 als ATR-Medium aufgenommene Infrarot-reflexionsspektren von FeS_2 (Pyrit). Reflexionswinkel: a) 30° , b) 35° , c) 40° , d) 45° .

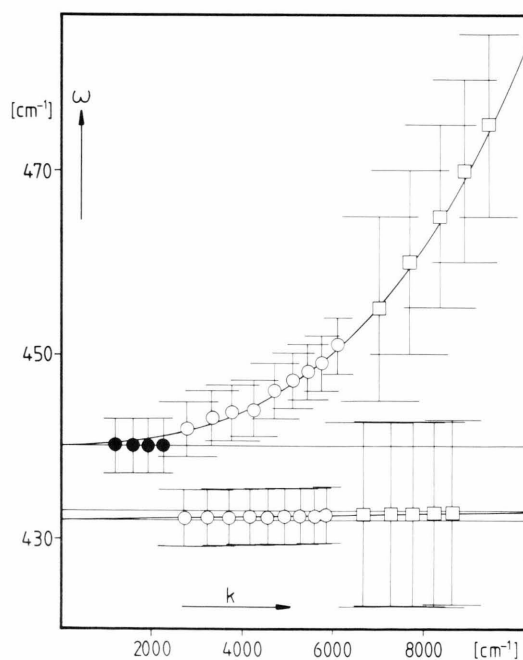


Abb. 2. Wendepunkte der Reflexionsspektren und Dispersionskurven $\omega = \omega(k)$ der Volumenpolaritonen von FeS_2 (Pyrit). Volle Kreise: ATR-Medium Luft. Kreise: ATR-Medium KRS-5. Quadrate: ATR-Medium Si.

* Sonderdruckanforderungen an M. Behmer, Institut für Mineralogie und Kristallographie der Universität Wien, A-1010 Wien, Dr. Karl Lueger-Ring 1, Österreich.

Brechungsindex des ATR-Mediums und k der Wellenvektor der sich im Kristall ausbreitenden Volumenpolaritonen.

Die Spektren wurden mit einem Gitterspektrographen (Perkin Elmer 580 B) und einer ATR-Zusatzeinrichtung (Beckman ATR UNIT TR 5) im Bereich von 25° bis 65° registriert. Der elektrische Feldvektor der einfallenden elektromagnetischen Welle wurde so polarisiert, daß dieser in der Einfallsebene lag (bekannt als TM-Geometrie, syn. TH-Geometrie). Als ATR-Medien wurden Luft, ein

KRS-5- ($n = 2,38$) und ein Si-Halbzyylinder ($n = 3,5$) verwendet. Der untersuchte Pyrit wurde mit Diamantpaste poliert.

Danksagung

Ich danke dem österreichischen Fonds zur Förderung der wissenschaftlichen Forschung (Projektnr. P 3735) für die finanzielle Unterstützung. Herrn Dr. W. Mikenda danke ich besonders für die Beistellung der ATR-Zusatzeinrichtung.

[1] H. D. Lutz, G. Kliche u. H. Haeuseler, Z. Naturforsch. **36a**, 184 (1981).

[2] H. J. Falge, A. Otto u. W. Sohler, Phys. Stat. Sol. (b) **63**, 259 (1974).

[3] W. Nitsch, H. J. Falge u. R. Claus, Z. Naturforsch. **29a**, 1011 (1974).

[4] E. Schuller, H. J. Falge u. G. Borstel, Phys. Stat. Sol. (b) **80**, 109 (1977).

[5] R. Claus, L. Merten u. J. Brandmüller, Springer Tracts in Modern Physics **75**, 178 (1975).

[6] N. J. Harrick, Internal Reflection Spectroscopy, Interscience Publishers, John Wiley & Sons, New York 1967.