

碱卤晶体中 F 心的 ESR 研究

Abstract: The F-colour centers in γ -irradiated alkali halide crystals (KCl, NaCl, KBr, LiF) were investigated by ESR method. The width of resonant spectral lines was calculated, which agrees with the experimental results. And the origin of the deviations between the theoretical results and the experimental ones are discussed.

一、引言

目前运转的色心激光器中使用的工作物质主要是碱卤晶体,“工作心”主要有 F_2 、 F_2^+ 、 F_2^- 以及杂质心等。这些色心几乎都是从 F 心演变而来的,因此 F 心是最基本的色心。由于 F 心是晶体中阴离子空位捕获一个电子,故它有顺磁性,可以用 ESR 方法去研究它的结构性质。

有关 F 心的 ESR 研究虽然国外早有许多报导^[1],但在国内尚少见。本文介绍我们对 KCl、NaCl、KBr、LiF 几种碱卤晶体的 F 心 ESR 研究结果。

二、实验与观察

将晶体沿[100]方向切割加工成 $\phi 5 \times 15$ 的小棒,然后用 γ 射线在常温下辐照样品。 γ 源是同位素 Co^{60} ,辐照剂量为 1×10^7 伦琴,辐照时间为 1 小时。刚辐照好的 NaCl 和 KCl 是棕红色, LiF 是淡绿色, KBr 是蓝绿色。经一段时间后样品颜色有不同程度的变化。NaCl 和 KCl 的颜色稍许变淡, LiF 由淡绿色变成淡黄色, KBr 则完全消失颜色。实验使用的仪器是 Vavial E-112 型 3 厘米波段谱仪,整个实验是在常温下进行的。

三、基本理论

基于 de Boer^[2] 提出的 F 心理论模型,因为只含有一个不成对的电子,因此它的哈密顿算符可以写成:

$$\mathcal{H} = g\beta\hat{H}S + a\hat{I}S \quad (1)$$

与 F 心近邻的核有两种,第一层相邻的阳离子是 6 个碱金属离子,第二层为 12 个卤离子。该系统的电子自旋和核自旋分别为:

$$S = \frac{1}{2} \cdots \cdots \text{电子自旋。}$$

$$I = \sum_{j=1}^6 I_j + \sum_{k=1}^{12} I_k \quad (2)$$

I_j ——碱金属离子的核自旋;

I_k ——卤离子的核自旋。

假设电子的自旋量子化方向与核的自旋量子化方向相同,都是沿外磁场方向且有:

$$g\beta\hat{H} \cdot S \gg a\hat{I} \quad (3)$$

则可以得到跃迁能量为;

$$h\nu = g\beta H_0 + a_j \sum_{j=1}^6 I_j + a_k \sum_{k=1}^{12} I_k \quad (4)$$

其中

$$a_i = -\frac{16}{3} \pi \frac{\beta\mu_i}{I_i} |\psi(i)|^2 \quad (5)$$

$i = j, k$

根据文献[3]可以得到 F 心的 ESR 谱线宽度为;

$$(\Delta H)^2 = \frac{1}{3} \sum_i h_i^2 I_i (I_i + 1) \quad (6)$$

$$h_i = \left(\frac{8\pi\mu_i}{3I_i} \right) |\psi(i)|^2 \quad (7)$$

根据(6)式就可以计算 F 心的谱线宽度。

四、结果和讨论

A. F. Kip^[3] 利用含有不同同位素 K^{39} 、 K^{41} 的 KCl 晶体的 h 值分别是:

$$\left. \begin{aligned} h(K) &= 7.56 \text{ 高斯} \\ h(Cl) &= 2.67 \text{ 高斯} \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

我们实验使用的样品和 KCl 一样都属于简立方晶体,具有相同的晶体结构,因此我们也利用上面的 $h(K)$ 和 $h(Cl)$ 值来推算它们的 F 心的 h 值和理论线宽 ΔH , 理论数据和实验结果列在表 1。从表 1 可以看出实验结果与理论数据基本吻合,从而说明 F 心的理论模型基本上是正确的,它能解释 ESR 谱。

表1 F心的ESR谱线宽度
计算值与实验数据表

样品	g	吸收线宽 计算值 ΔH (高斯)	微分峰值 线宽计算值 ΔH_p (高斯)	实验值 ΔH_p (高斯)
KCl	1.990			58.00
*	1.995			54.00
NaCl	1.983	188.09	158.94	168.00
*	1.987			162.00
KBr	1.995	133.11	113.08	150.00
*	1.986			146.00
LiF	1.982	141.11	119.87	143.75
*	2.001			150.00

* 为文献报道数值

对于 LiF 样品, 实验中还观察到超精细结构(图1), 这种结构同理论上分析是一致的。如果只考虑 F 心周围第一壳层上 6 个 Li 离子对 F 心的影响, 则理论谱线数目应为:

$$2(nM_I) + 1 = 2 \times 6 \times \frac{3}{2} + 1 = 19 \text{ (条)}$$

其中, n ——第一壳层 Li 离子数目; M_I ——Li 离子的核自旋量子数。

从图1看出, 超精细结构比 19 条略多, 这可能

是第二壳层 12 个氟离子影响的结果。其它几种晶体没有观察到这种超精细结构。

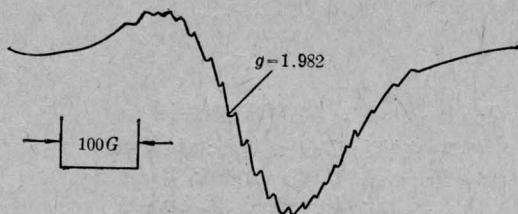


图1 LiF 晶体 F 心 ESR 谱

从实验数据还看出, 理论与实验结果是有一定差距。除了实验测量有误差这个原因外, 还可能有:

- (1) 实验样品都是 [100] 方向, 而计算中没有考虑各向异性超精细结构常数的影响;
- (2) γ 辐照的晶体, 除了形成 F 心外, 还可能存在别的色心, 或 F 心聚集。只要这些色心有不对称的电子都可能对 F 心的 ESR 谱带来影响。

参 考 文 献

- [1] W. C. Holton *et al.*; *Phys. Rev.*, 1967, **125**, 89.
- [2] J. H. de Boer; *Rec. Trav. Chim.*, 1937, **56**, 301.
- [3] A. F. Kip *et al.*; *Phys. Rev.*, 1953, **91**, 1066.

(中国科学院上海光机所 傅文标
上海交通大学 李胜华
1983 年 9 月 27 日收稿)

闪光灯泵浦染料 DCM 的激光特性

Abstract: The laser characteristics of flashlamp pumped DCM dye are experimentally investigated. The laser pulse width, tuning range and laser efficiency of DCM are given. Under the flashlamp excitation, the ethanal solution of DCM is safer and more convenient, and the laser efficiency is higher.

激光染料 DCM 出现以来, 用各种泵浦方法获得了激光输出^[1~4]。文本叙述我们用闪光灯泵浦 DCM 乙醇溶液和二甲基甲酰胺溶液的激光特性。

实验装置如图1。采用玻璃双椭圆聚光腔, 腔内装有两支 $\phi 8 \times 100$ 毫米脉冲氙灯及染料池, 采用全腔水冷。一种染料池为 $\phi 3 \times 100$ 毫米的石英管, 另一种是采用矩形双通道染料池^[5]的一个通道, 其

截面积为 10 毫米², 长 100 毫米, 在另一通道中通入乙醇。用 1200 线/毫米的光栅取自准式放置进行调谐, 调谐范围和峰值波长用 WDG-500-1 型光栅单色仪测量, 用 GD 型强流光电管和 SS-6300 示波器记录脉冲波形, 用 NJ-J1 能量计测量激光能量。

图2为闪光灯泵浦 DCM 乙醇溶液的激光脉冲波形, 脉宽(FWHM)为 0.61 微秒, 全宽度为 1.04