

**OPTISCHE EIGENSCHAFTEN UND ELEKTRONISCHE
STRUKTUR VON ALKALI-HYPEROXID-KRISTALLEN**

ABHANDLUNG

zur Erlangung

des Titels eines Doktors der technischen Wissenschaften
der

EIDGENOESSISCHEN TECHNISCHEN
HOCHSCHULE ZUERICH

vorgelegt von

MARTIN A. BOESCH

Dipl. Phys. ETH Zürich

geboren am 7. Juni 1941

von Stein(St. Gallen)

Angenommen auf Antrag von

Prof. Dr. W. Känzig, Referent

Prof. Dr. H. C. Siegmann, Korreferent

Clausthal-Zellerfeld
Bönecké-Druck

1975

Abstract

The optical properties of alkali-hyperoxides have been investigated in the energy range from .004 to 11 eV and in the temperature range from 5 K to 300 K using single crystals grown in liquid ammonia.

The Raman- and far infrared spectra of NaO_2 can be understood on the basis of the rigid ion model. For the Marcasite phase of NaO_2 the phonon dispersion has been determined for the Σ - and Λ -direction in the first Brillouin zone.

An investigation of the refractive indices permitted the determination of the polarizability tensor of the O_2^- molecule-ion.

The reflection spectrum of NaO_2 from visible to vacuum ultraviolet was measured using as-grown crystal faces and surfaces produced by cleavage in high vacuum. A simple electronic energy level scheme is proposed for the interpretation of the results.

Zusammenfassung

Die optischen Eigenschaften von Alkalihyperoxiden wurden im Bereich von 4 eV bis 11 eV und von 5 K bis 300 K untersucht. Die Messungen wurden an im flüssigen Ammoniak gezüchteten Einkristallen durchgeführt. Die gemessenen Raman- und Fern-Infrarot-Spektren von NaO_2 können mit Hilfe der Symmetrieanalyse und des "Rigid Ion"-Modells verstanden werden. Für die Markasitphase von NaO_2 werden zudem die Phonondispersionskurven für die Σ - und Λ -Richtung der 1. Brillouinzone angegeben.

Die Messung der Brechungsindizes ermöglichte die Bestimmung des Polarisierbarkeitstensors des O_2^- -Moleküliions. Das Reflexionspektrum von NaO_2 in den verschiedenen Phasen wurde bis in den Vakuum-Ultraviolett-Energiebereich hinein an gewachsenen Flächen und an in situ bei tiefer Temperatur erzeugten Spaltflächen gemessen. Ein einfaches Energieniveauschema wird zur Erklärung der Spektren vorgeschlagen.