

# Kritische Anmerkungen zur Auswertung von diffusen Reflektionsspektren

M.Thiede  
(J. Melsheimer\*)

Fritz-Haber-Institut der Max-Planck-Gesellschaft, Abteilung Anorganische Chemie,  
Faradayweg 4 – 6, 14195 Berlin

Die Reflexionsspektroskopie wird normalerweise zur Bestimmung der Eigenschaften von Oberflächen wie Farbe oder Anteile von diffuser und direkter Reflexion verwendet. Darüber hinaus können pulverförmige Materialien, die häufig in der Katalyse verwendet werden, in vielen Fällen nur in diffuser Reflexion vermessen werden. In der Literatur geben verschiedene Autoren die unterschiedlichsten Verfahren an, mit denen ein Quasi – Absorptionsspektrum aus der Reflexionsmessung erzeugt werden kann, z.B. durch die Berechnung von optischer Dichte,  $1 - R$  oder  $F(R)$ .

Diese Arbeit befaßt sich mit einigen grundsätzlichen Fragestellungen, die bei solchen Reflexionsmessungen auftreten können:

- Welche Informationen sind im Reflexionsspektrum enthalten?
- Welche Darstellung der y-Achse kommt einer Absorptionsmessung am nächsten?
- Sind Verdünnungsreihen, wie sie in der Transmissionsspektroskopie oft verwendet werden, auch in der Reflexionsspektroskopie sinnvoll?

Um den Zusammenhang zwischen Absorptions- und Reflexionsspektren zu klären, sind Holmiumoxidfiltergläser zunächst in Transmission bzw. Absorption vermessen worden; danach wurden die Filtergläser gemörsert, verschiedene Korngrößen ausgesiebt und anschließend sowohl unverdünnt wie auch verdünnt mit  $\text{SiO}_2$ -Pulver Reflexionsspektren aufgenommen.

Ergebnisse und Schlußfolgerungen:

- Die Reflexionsspektren ändern sich in Abhängigkeit von der Korngröße in ähnlicher Weise wie sich Transmissionsspektren in Abhängigkeit von der Schichtdicke ändern.
- Die Darstellung als  $F(R)$ -Spektrum ohne irgendwelche Einschränkungen kommt in ihren Charakteristika (Maxima etc.) dem Absorptionsspektrum am nächsten.
- Verdünnungen bringen keine Verbesserung der spektroskopischen Charakteristika, sondern nur eine Schwächung des Signalanteils des Probenmaterials.

\*Autor auf Poster, aber nicht auf eingereichtem Abstract