

LiNbO₃ 晶格振动图象及其光学特性

马光群

吴以勤

(南京大学)

(安徽大学)

晶体的许多性质都与晶格的振动有很重要的关系。晶格振动是很复杂的问题, 但是若把振动作一些简化, 晶格振动图象也是可以弄清楚的。在简谐近似下, 晶格的振动是互相独立的。本文用群表示论的本征函数法作出 LiNbO₃ 晶格的振动图象。

LiNbO₃ 是三角晶系, 其空间群是 O_{3v}^6 。这个群有三个类: $O_1 = E$, $O_2 = O_3^+ + O_3^-$, $O_3 = \sigma_{d1} + \sigma_{d2} + \sigma_{d3}$ 。LiNbO₃ 原胞由六个氧原子、锂铌各两个原子组成。现取出三个原胞沿 z 轴把它们投影到 (xy) 平面内。

用本征函数法很易找出 O_{3v}^6 的第一类完备算符集是 $O_3 = \sigma_{d1} + \sigma_{d2} + \sigma_{d3}$, 其本征值谱为 $\pm 3, 0$ 。每个原子发生位移, 若用柱坐标表示, 其 z 方向和 (xy) 平面可以分开讨论。由展开定理知, 全部振动都属于喇曼光效。只有全部二维的表示对应的振动是属于红外光效的。另外三个整体的平移则属于声波的振动。