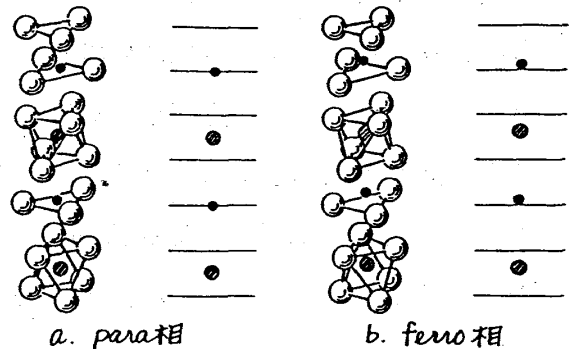


1. LiNbO_3 の複屈折と強誘電性

八 木 均

LiNbO_3 は三方晶系に属する強誘電体である。相転移点 $T_c = 1210^\circ\text{C}$ を境に、高温側の *para* 相では空間群 D_{3d} 、低温側の *ferro* 相では空間群 C_{6v} に属する。両相での結晶構造は図1に示す通りである。

結晶引き上げ法で、大形・良質の単結晶育成が可能になり、物性の測定が盛んに行われ、また、光エレクトロニクス技術の発達に伴い、この物質の示す非線形的性質 (SHG 発生等) も用いて、様々な応用がなされている。ここでは、基礎的物性である複屈折 Δn を微視的な立場から、双極子モデルを用いて説明することと試みに、

図1: LiNbO_3 の結晶構造

以前の議論では、全ての酸素が同じ分極をし、また、

Li , Nb 両イオンが変位していない構造 (*para* 構造) をとると仮定した。これに対し、今回の研究では、結晶構造からみて、酸素には数種類の分極があると考え、また、構造も *ferro* 構造そのものとする。

各々のイオンの電子分極率を、 $\alpha_o = 2.394 (\text{\AA}^3)$, $\alpha_{\text{Li}} = 0.03 (\text{\AA}^3)$, $\alpha_{\text{Nb}} = 0.35 (\text{\AA}^3)$ とし、

$$\frac{\partial \epsilon_i}{\partial E_i} = \epsilon_i(\omega_i) = \gamma_{ij} k_j + E_{\text{ex}} \quad (i, j = 01, 02, 03, \text{Li, Nb})$$

$$P = \frac{1}{V_{\text{unit}}} \cdot \sum_i C_i k_i E_{\text{ex}} \quad (C_i: \text{単位胞内の双極子 } k_i \text{ の個数})$$

$$n^2 = \epsilon = \frac{D}{E_{\text{ex}}} = \frac{E_{\text{ex}} + 4\pi P}{E_{\text{ex}}} = 1 + 4\pi \frac{P}{E_{\text{ex}}}$$

より、屈折率 n と複屈折 $\Delta n = n_e - n_o$ を求めると、図2, 3に示す結果が得られた。これを見ると、全温度領域で $\Delta n > 0$ である。そこで、自発カー効果 (自発分極による大まな局所場によって、分極軸方向の電子分極率が減少する効果) による電子分極率の異方性を考える。Slater 型軌道関数を用いると、例えば、 Nb イオンの電子分極率は、分極軸方向では、 $\alpha_{\text{Nb}} = 0.35 (1 - 7.3736 \times 10^{-16} E_{\text{Nb}}^2) (\text{\AA}^3)$ となる。これにより、 n_e が減少し、低温領域では $\Delta n < 0$ になると予想された。

また、イオンのポテンシャル U を定式化することにより、大まな自発分極 $P_s = 71 (\mu\text{C}/\text{cm}^2)$ (at R.T.) の発現機構についても言及しようと思う。

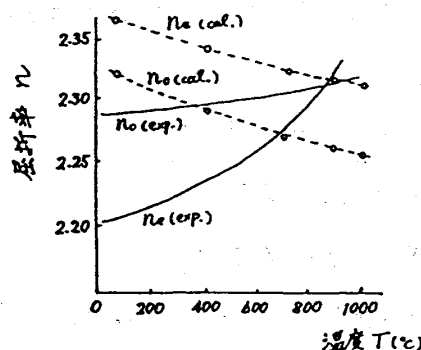


図2: 屈折率の温度変化

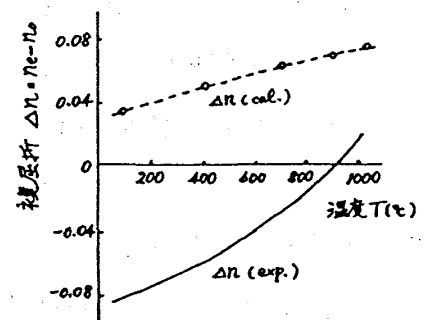


図3: 複屈折の温度変化