

掺 Nd 钼石类激光晶体的 Raman 光谱研究

卢贵武¹⁾ 夏海瑞¹⁾ 孟宪林²⁾ 刘雪松²⁾ 杨卫兵³⁾

¹⁾ 山东大学物理系, 济南 250100)

²⁾ 山东大学晶体材料研究所, 济南 250100)

³⁾ 胜利油田测井公司, 山东东营 257062)

(2001 年 5 月 8 日收到, 2001 年 6 月 9 日收到修改稿)

测量了 Nd:YVO₄ 和 Nd:GdVO₄ 两种激光晶体的高温拉曼光谱. 根据空间群理论指认了测定的特征谱线, 依据晶格动力学理论导出了晶体热导率与积分拉曼散射强度的关系. 计算了不同方向的晶体热导率, 得到了与实验符合的结果. 把 Nd:GdVO₄ 晶体的高热导率归因于授主离子的质量和半径的增大, 以及由此导致的晶体场效应的显著增强.

关键词: Raman 光谱, 激光晶体, 热导率, 空间群

PACC: 7830, 8100F

1 引 言

Nd:YVO₄(NYV)是一种优良的激光晶体. 它具有大的受激发射截面、适宜的亚稳态寿命、强而宽的抽运吸收带, 因此特别适合制作高光损伤阈值、高效率二极管抽运固体激光器, 目前已有多种类型的激光器进入市场. 近年来, 一种新型激光晶体材料 Nd:GdVO₄(NGV)引起人们的重视, 研究发现 NGV 晶体除了具有与 NYV 晶体相似的激光特性之外, 它具有更高的吸收系数和发射截面, 其热导率在 [110] 方向几乎是 NYV 晶体的 2 倍, 这就能够有效避免抽运诱导热透镜效应, 有望在高功率抽运固体激光器中得到应用^[1-4].

光谱技术(包括 Raman 和红外光谱测量技术)是研究晶体微观结构和各向异性、探索晶体生长机制和晶格缺陷、确定材料热导率的有力手段, 这些领域已有大量的文献报道^[5-9]. 但目前利用 Raman 光谱研究激光晶体热导率的文献还不多见. 本文测量了 NYV 和 NGV 两种激光晶体的高温 Raman 光谱, 用群论和晶格动力学观点对其进行详细分析, 推导了热导率与积分散射强度的关系, 为掺杂改性提供理论指导.

2 I₄/amd 空间群晶体的群论分析

Nd_xY_{1-x}VO₄ 和 Nd_yGd_{1-y}VO₄ 均属钼石类晶体,

点群为 4/*mmm*, 空间群为 I₄/*amd*, 其物理学单胞中含有四个分子式, 共 24 个原子, 有 72 个基本晶格振动模式. 当选择对称中心为坐标原点时, Nd³⁺ 或 Y³⁺ 或 Gd³⁺ 离子均占据 4*a* 乌克夫位置, V⁵⁺ 离子占据 4*b* 乌克夫位置, O²⁻ 离子占据 16*h* 乌克夫位置^[10], 单胞内原子的位置坐标列于表 1. 原子吸收光谱显示 $x = 0.025$, $y = 0.02$, 因此平均 10 个 NYV 单胞中有 1 个 Nd³⁺ 离子, 平均 25 个 NGV 单胞中有 2 个 Nd³⁺ 离子. 将这 72 个简正振动模式按商群理论进行对称性分类. 利用结晶学国际表中 I₄/*amd* 对称操作的俯视图和相关信息^[11], 可求出第一布里渊区中心 Γ 点 I₄/*amd* 空间群的不可约表示, 如表 2 所示. 由商群理论, 按照 I₄/*amd* 的乌克夫位置, 可将表 2 中的各不可约表示约化为点群 4/*mmm* 的不可约表示, 得到钼石类晶体的简正振动模式的对称性分类为

$$\Gamma = 5A_{1g} + 2A_{1u} + 2A_{2g} + 7A_{2u} + 7B_{1g} + 2B_{1u} + 2B_{2g} + 5B_{2u} + 10E_g + 10E_u.$$

合计共有 72 个简正模, 与实有原子数 24 对应的运动自由度 72 相等. 由点群 4/*mmm* 的特征标表可知, 1A_{2u} 和 1E_u 为声学模, 5A_{1g}, 7B_{1g} 和 2B_{2g} 为 Raman 活性光学模, 10E_g 为 Raman 活性二重简并光学模, 其余均为非 Raman 活性光学模. 因此理论上讲, 扣除简并情况, 钼石类晶体最多能观察到 24 支 Raman 活性光学模, 即为

$$\Gamma_{\text{vib}} = 5A_{1g} + 7B_{1g} + 2B_{2g} + 10E_g. \quad (1)$$

表 1 钨石类激光晶体单胞中原子的位置和坐标

原子	乌可夫位置	位置对称性	位置坐标
Y 或 Gd 或 Nd	4a	$\bar{4}m2$	$(0\ 0\ 0)$ $(0\ 1/2\ 1/4)$ $(1/2\ 1/2\ 1/2)$ $(1/2\ 0\ 3/4)$
V	4b	$\bar{4}m2$	$(0\ 0\ 1/2)$ $(0\ 1/2\ 3/4)$ $(1/2\ 1/2\ 0)$ $(1/2\ 0\ 1/4)$
O	16h	m	$0 \leq y \leq 1/2, 0 \leq z \leq 1/8$ $(0, y, z)$ $(1/2, 1/2 - y, 1/2 + z)$; $(-y, 1/2, z + 1/4)$ $(1/2 + y, 0, 3/4 + z)$ $(1/2, y, 3/4 - z)$ $(0, 1/2 - y, 1/4 - z)$ $(1/2 + y, 1/2, 1/2 - z)$; $(-y, 0, -z)$ $(1/2, 1/2 + y, 1/2 + z)$ $(0, -y, z)$ $(1/2 - y, 0, 3/4 + z)$ $(y, 1/2, 1/4 + z)$ $(0, 1/2 + y, 1/4 - z)$ $(1/2, -y, 3/4 - z)$ $(y, 0, -z)$ $(1/2 - y, 1/2, 1/2 - z)$

表 2 在 Γ 点时 I_{41}/amd 空间群的约可表示

对称操作的 Seitz 算符	原子、乌可夫位置和特征标		
	O	V	Y 或 Gd 或 Nd
	16h	4b	4a
$\{I\ 000\} 0 \}$	48	12	12
$\{4\ 001\} \tau \}$	0	0	0
$\{4^2\ 001\} \tau \}$	0	0	0
$\{2\ 001\} 0 \}$	0	-4	-4
$\{2\ 010\} \tau \}$	0	0	0
$\{2\ 100\} \tau \}$	0	0	0
$\{2\ 110\} 0 \}$	0	-2	-2
$\{2\ 1\bar{1}0\} 0 \}$	0	-2	-2
$\{I\ 000\} \tau \}$	0	0	0
$\{4\ 001\} 0 \}$	0	-2	-2
$\{4^2\ 001\} 0 \}$	0	-2	-2
$\{\sigma_h\ 001\} \tau \}$	0	0	0
$\{\sigma_v\ 100\} 0 \}$	8	4	4
$\{\sigma_v\ 010\} 0 \}$	8	4	4
$\{\sigma_d\ 110\} \tau \}$	0	0	0
$\{\sigma_d\ 1\bar{1}0\} \tau \}$	0	0	0

注 $\tau = 0 + b/2 + c/4$.

3 样品制备与实验配置

所制备的样品有两种:NYV 和 NGV,均为 x - y - z 切型,前者尺寸为 $9\text{mm} \times 9\text{mm} \times 12\text{mm}$,后者的尺寸为 $8\text{mm} \times 8\text{mm} \times 10\text{mm}$.两种样品的定向误差均小于 $10'$,表面均被抛光成光学平面.实验是在 SPEX-1403 拉曼谱仪上进行的,温度为 500K ,激励线波长为氩

离子激光器的 514.5nm ,功率为 300mW ,样品表面功率密度约为 $1.8\text{W}/\text{cm}^2$,谱线的分辨率和精度分别为 0.15cm^{-1} 和 1cm^{-1} ,拉曼谱在 100 — 1000cm^{-1} 波数范围内收集 3 次.

简正振动模 A_{1g} , B_{1g} 和 B_{2g} 的 Raman 散射张量矩阵分别为

$$\begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & a & 0 \\ 0 & 0 & b \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} c & 0 & 0 \\ 0 & -c & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ 和 } \begin{bmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

简正振动模 E_g 的 Raman 散射张量矩阵有两个

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & e \\ 0 & 0 & 0 \\ e & 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ 和 } \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e \\ 0 & e & 0 \end{bmatrix}.$$

按照 Loudon 理论以及散射效率的计算公式^[12],确定出实验配置如下:

$$A_{1g}: X(ZZ)Y; A_{1g} + B_{1g}: X(YY)Z;$$

$$B_{2g}: X(YX)Y; E_g: Z(YZ)X,$$

共四种几何配置.

4 实验结果与讨论

图 1 为两种样品的 A_{1g} 全对称类拉曼活性光学声子模.对 NYV 样品,4 个拉曼峰的波数分别为 $380\text{cm}^{-1}(\nu_2)$, $775\text{cm}^{-1}(\nu_5)$, $849\text{cm}^{-1}(\nu_3)$ 和 $891\text{cm}^{-1}(\nu_1)$ (见图 1(a)).与自由 VO_4^{3-} 离子的拉曼谱^[13]比较, ν_2 可指认为 O—V—O 面内弯曲振动模, ν_1 可指认为 V—O 伸缩振动模. Weinstock 等^[13]指出,在自由 VO_4 离子的拉曼光谱中, ν_2 和 ν_4 常常是很接近的,以致于不能观察到它们单独的谱带,因此在我们的实验中还有一条全对称拉曼活性光学声子模(即 ν_4 , 面内弯曲振动模)由于被 ν_2 谱带所掩盖而未观察到.但是对于 NGV 样品,波数为 $377(\nu_2)$, $384(\nu_4)$, 760 , 821 和 880cm^{-1} 的 5 条全对称类拉曼活性光学声子模全部被观测到(见图 1(b)),与 NYV 比较除波数红移了 3 — 28cm^{-1} 外,最明显的特征是 ν_2 和 ν_4 谱带显著加宽并相互远离了 7cm^{-1} .

图 2 显示了两种样品 $A_{1g} + B_{1g}$ 对称类的拉曼活性光学声子模.与图 1 比较, NYV 的 B_{1g} 类模为 160 , 263 , 486 , 735 和 816cm^{-1} , NGV 晶体的 B_{1g} 类模为 121 , 260 , 480 , 728 和 806cm^{-1} .从图 2 看,除了 121cm^{-1} 模比 NYV 样品的 160cm^{-1} 模降低 39 个波数外,其他 4 条模均能较好的对应(红移不超过 10 个

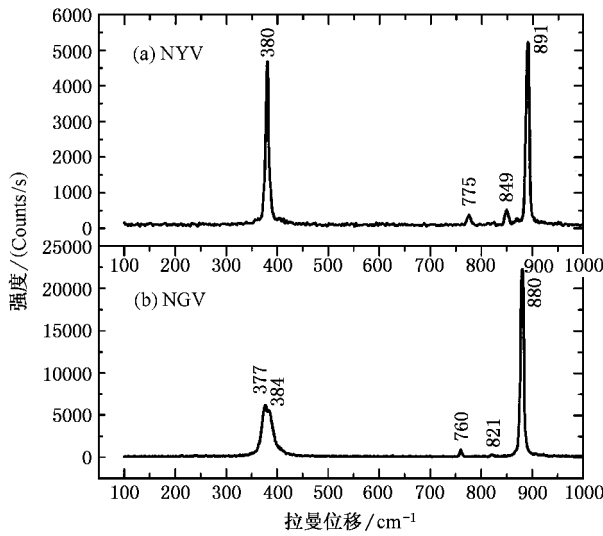


图 1 高温下 NYV (a) 和 NGV (b) 晶体在 X(ZZ)Y 几何配置中的 Raman 谱

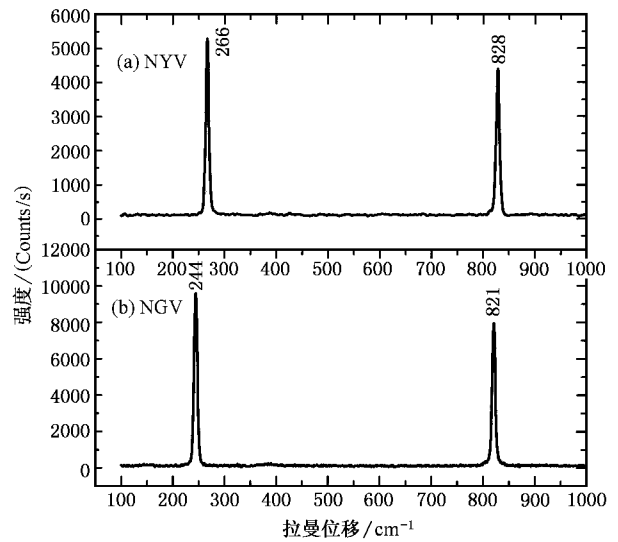


图 3 高温下 NYV (a) 和 NGV (b) 晶体在 X(YX)Y 几何配置中的 Raman 谱

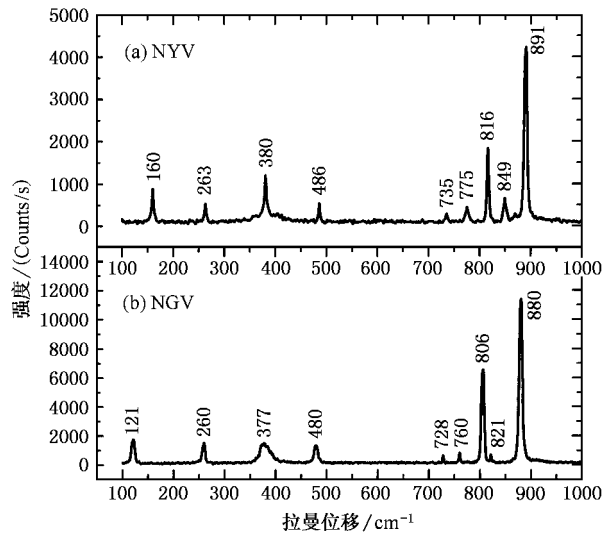


图 2 高温下 NYV (a) 和 NGV (b) 晶体在 X(YY)Z 几何配置中的 Raman 谱

体,它们的波数分别为 163, 260, 384, 837 和 888 cm^{-1} 对于 NGV 样品,这些模分别为 153, 240, 378, 820 和 879 cm^{-1} ,分别红移 10, 20, 6, 18 和 9 个波数,其中 820 cm^{-1} 模显著加宽,其散射强度几乎比 NYV 增强 2 倍.

波数). 121 和 160 cm^{-1} 模可分别指认为 GdO_8 和 YO_8 十二面体集团外振动,由于 Gd 原子的质量(157.2g/mol)几乎是 Y 原子质量(88.91g/mol)的两倍,因此其振动频率降低了 40 个波数.此外尚有 2 条 B_{1g} 类模由于其谱线强度较弱未能观测到.

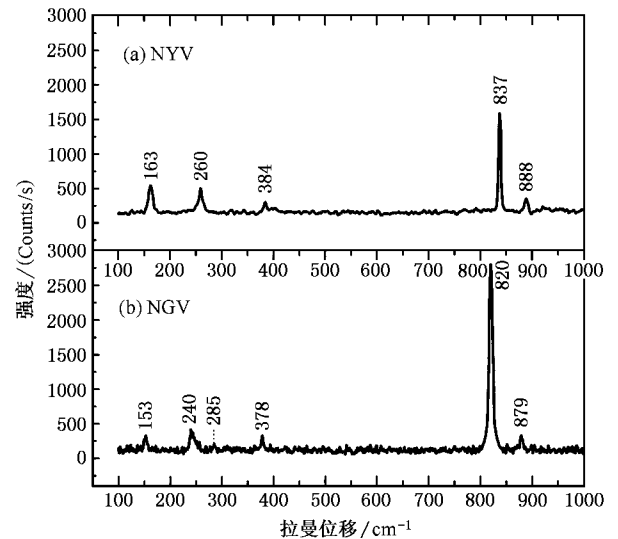


图 4 高温下 NYV (a) 和 NGV (b) 晶体在 Z(YZ)X 几何配置中的 Raman 谱

在图 3 中,对 NYV 样品观察到两条属于 B_{2g} 对称类的拉曼谱线,其振动频率为 266 和 828 cm^{-1} .而在 NGV 样品中其振动频率为 244 和 821 cm^{-1} ,分别红移 22 和 7 个波数,它们的强度也明显增强.图 4 比较了两种样品的 E_g 对称类拉曼谱线,对 NYV 晶

用 Lorentzian 线型对图 1—4 的拉曼线进行曲线拟合得到其积分散射强度,结果见表 3.在表 3 中我们还指认了观察到的所有拉曼谱线的对称类型和简正振动模式,并对两种样品特征拉曼谱线的拉曼红移、积分散射强度进行了比较.总体来说,NGV 晶体

拉曼谱线的波数比 NYV 晶体的相应谱线有所减少,其特征谱线的积分散射强度均有显著增强.

夏海瑞等认为^[14],在对晶体进行掺杂改性时,掺杂离子和受主离子有效半径相差较大会引起离子在同一位置的无规分布,这种分布的随机性造成晶体的无序并导致谱线减弱.这是我们观察到的谱线比预计的谱线少的重要原因. Rao^[15]认为晶体场效应相对变弱会使晶格振动峰减弱或消失,并导致拉曼峰的窄化.在 YVO₄(或 GdVO₄)晶体中,一个 Y(或 Gd)原子和八个氧原子构成 YO₈(或 GdO₈)正十二面

体,四个最近邻氧原子和四个次近邻氧原子与 Y 原子的距离分别约为 0.2299nm 和 0.2443nm.而 V 原子与四个最近邻 O 原子构成 VO₄ 正四面体,V—O 距离均为 0.1706nm.注意到 Nd³⁺ 和 Gd³⁺ 离子的有效半径分别为 0.115nm 和 0.111nm,两者比较接近,而 Y³⁺ 离子的有效半径为 0.106nm,与 Nd³⁺ 的有效半径相差较大.因此 NGV 晶体的晶体场效应与 NYV 晶体比较有所增强,这种特征必然造成其谱线加宽和散射强度的显著增强.

表 3 钇石类激光晶体 Raman 谱的指认和谱线积分散射强度对比分析

Raman 频移/cm ⁻¹		积分散射强度比 (I _{NGV} /I _{NYV})	谱线红移 (ν _{NYV} - ν _{NGV})	对称类型	简正振动模的近似描述
NYV	NGV				
160	121	3.21	39	B _{1g}	集团外振动
163	153		10	E _g	O-G(Y)O 弯曲
260	240		20	E _g	ν ₆ , G(Y)O ₈ 伸缩
263	260		3	B _{1g}	G(Y)O ₈ 伸缩
266	244	1.95	22	B _{2g}	G(Y)O ₈ 伸缩
380	377, 384		3—4	A _{1g}	ν ₂ , ν ₄ , O-V-O 弯曲
384	378		6	E _g	ν ₂ , ν ₄ , O-V-O 弯曲
486	480		6	B _{1g}	2ν ₆
735	728		7	B _{1g}	2ν ₂
775	760		15	A _{1g}	2ν ₄
816	806	4.32	10	B _{1g}	ν ₃ , VO ₄ 对称伸缩
828	821	1.82	7	B _{2g}	ν ₃ , VO ₄ 对称伸缩
837	820	2.52	17	E _g	ν ₃ , VO ₄ 对称伸缩
849	821		28	A _{1g}	ν ₃ , VO ₄ 对称伸缩
888	879		9	E _g	ν ₁ , VO ₄ 反对称伸缩
891	880	4.52	11	A _{1g}	ν ₁ , VO ₄ 反对称伸缩

依据晶格动力学理论,晶体的热导率 κ 与温度 T 的关系可表述为^[9]

$$\kappa = A \frac{T^3}{\nu_s} \int_0^{\Theta/T} \frac{\tau(x) x^4 e^x dx}{(e^x - 1)^2}, \quad (2)$$

式中 A 是常数, ν_s 是晶体的平均声速, τ 是声子的寿命, x = hν/kT (ν 是晶格振动频率, h 是普朗克常数, k 是玻耳兹曼常数); Θ 是德拜温度,它标志晶格振动最高频率 ν_D 的热能对应的温度,即

$$\Theta = h\nu_D/k = hc \tilde{\nu}_D/k. \quad (3)$$

c 是光速 (cm/s 单位), ν_D 即晶格振动最高频率对应的波数 (cm⁻¹). 对温度较高时的低频晶格振动有 x ≪ 1, 即 e^x ≈ 1 + x, 因此 (2) 式变换为

$$\kappa = A_0 \int_0^{\tilde{\nu}_D} \frac{\tau(\tilde{\nu}) \tilde{\nu}^3 d\tilde{\nu}}{1 - e^{-hc \tilde{\nu}/kT}}, \quad (4)$$

其中 A₀ 是与温度及声速有关的常数, ν̃ 是晶格振动频率对应的波数 (cm⁻¹ 单位). 晶体缺陷的散射对声

子在晶体中传播的自由程有重要影响,此时低频声子寿命可近似表述为^[16]

$$\tau = \frac{B}{\nu_s \tilde{\nu}^4}, \quad (5)$$

其中 B 是常数,实验表明掺杂对钇石类晶体的声速影响很小^[17],因此有

$$\kappa = C \int_0^{\tilde{\nu}_D} \frac{d\tilde{\nu}}{\tilde{\nu} (1 - e^{-hc \tilde{\nu}/kT})}, \quad (6)$$

式中 C 是与温度有关的常数.

晶体的拉曼散射强度可表述为^[18]

$$I(\nu) = K \frac{(\nu_0 - \nu)^4}{\nu (1 - e^{-h\nu/kT})}, \quad (7)$$

K 是与温度有关的常数, ν₀ 是入射光频率, ν 是晶格振动频率 (斯托克斯频率). 当入射激光在可见光区、晶格振动频率在低频区域时, ν 比 ν₀ 小两个数量级,略去 ν/ν₀ 的高次项得

$$K(\nu) = K \frac{\nu_0^3}{\nu(1 - e^{-h\nu/kT})}, \quad (8)$$

作变换 $\tilde{\nu} = \nu/c$ 并在 $(0, \tilde{\nu}_D)$ 区间对 $\tilde{\nu}$ 积分得积分散射强度

$$S = \int K(\nu) d\nu = K_0 \int_0^{\tilde{\nu}_D} \frac{d\tilde{\nu}}{\tilde{\nu}(1 - e^{-hc\tilde{\nu}/kT})}, \quad (9)$$

K_0 是与温度及入射激光频率有关的常数. 将(9)式代入(6)式得到晶体热导率 κ 与积分散射强度 S 的关系式

$$\kappa = C_0 S. \quad (10)$$

(9)式和(10)式表明当晶体低频拉曼谱积分散射强度增强(即谱线加宽,强度增大)时晶体热导率升高. 实验表明^[17] NYV 晶体的德拜温度为 442K, 相应晶格振动频率的波数为 307cm^{-1} , 该谱线应属 YO_8 十二体的伸缩振动带, 可能是该谱线强度较弱未能在我们的实验中观察到. 但从表 3 中发现 YO_8 和 GO_8 十二体的伸缩振动频率的红移大多在 20 个波数以上, 因此预计在 NGV 晶体的拉曼光谱中应能在 287cm^{-1} 附近观察到较弱的拉曼峰. 这部分曲线经过多次扫描, 我们在 285cm^{-1} 附近发现了这个弱峰(见图 4(b)). 可以利用 YO_8 和 GdO_8 集团的最高振动频率(307cm^{-1} 和 285cm^{-1})以及拉曼积分散射强度来计算它们的热导率(见表 4). 在 $X(YX)Y$ 配置下, 声子沿 $[110]$ 方向传播, 此时计算给出在 $[110]$ 方向 NGV 晶体和 NYV 晶体的热导率之比为 1.856; 而在 $X(YY)Z$ 和 $Z(YZ)X$ 配置下, 声子沿 $[101]$ 方向传播, 此时计算出 $[101]$ 方向的热导率之比小于 1.236, 这些结果与实验测定结果^[4] 十分符合. 我们的测量也发现随着温度的下降几个 Raman 谱线特征峰的波数有少许蓝移, 其强度显著增强, 即积分拉曼散射

强度随温度的降低而增强. 因此依据(10)式我们认为激光晶体的热导率随温度降低而升高, 这和多孔硅及金刚石的测量结果^[8] 基本一致. 至于室温及低温条件下热导率与积分拉曼散射强度的定量关系还有待进一步分析和探讨.

表 4 NGV 和 NYV 激光晶体热导率之比($\kappa_{\text{NGV}}/\kappa_{\text{NYV}}$) 的计算结果

晶体	$\tilde{\nu}_D/\text{cm}^{-1}$	$\kappa_{\text{NGV}}/\kappa_{\text{NYV}}$		
		$X(YY)Z$ 配置	$X(YX)Y$ 配置	$Z(YZ)X$ 配置
NYV	307	1.236	1.856	1.086
NGV	285			

5 结 论

测量和分析比较了两种样品的高温拉曼散射谱. 由于 NGV 晶体的平均原子质量大, 受主离子半径大于掺杂离子半径, 而 NYV 晶体中受主离子半径小于掺杂离子半径, 因此掺杂离子对 NGV 晶体的晶体场影响小, 而对 NYV 晶体的影响较大(显著削弱了晶体场效应), 这是 NGV 晶体的谱线加宽和积分散射强度显著增强的原因. 通过引入德拜温度把晶体的热导率与 YO_8 和 GO_8 十二面体集团振动的最高频率(波数)和积分拉曼散射强度关联起来, 计算了两种晶体在不同方向的热导率之比, 发现在 $[110]$ 方向 NGV 晶体和 NYV 晶体的热导率之比为 1.856. NGV 晶体的高热导率主要归因于晶体场效应导致的谱线增强和显著加宽. 看来, 要进一步提高锆石类激光晶体材料的性能, 除了选择离子半径和原子量较小的激活离子进行掺杂改性外, 提高基质材料的离子半径和离子质量或许能得到出人意料的结果.

[1] Jensen T, Ostroumov V G, Meyn J P, Huber G, Zagumennyi A I, Shcherbakov I A 1994 *Appl. Phys.* **B58** 373
 [2] Shimamura K, Uda S, Kochurikhin V V, Taniuchi T, Fukuda T 1996 *Jpn. J. Appl. Phys.* **35** 1832
 [3] Zhang H J, Meng X L, Zhu L, Zhang H Z, Wang P, Dawes J, Wang C Q and Chow Y T 1998 *Cryst. Res. Technol.* **33** 801
 [4] Studenikin P A, Zagumennyi A J, Zavartsev Y D, Popov P A, Shcherbakov I A 1995 *Quantum Electron* **25** 1162
 [5] Li Z F *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1614 (in Chinese) [李志锋等 2000 物理学报 **49** 1614]

[6] Zhu K G *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2304 (in Chinese) [朱开贵等 2000 物理学报 **49** 2304]
 [7] Meng X J *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 371 (in Chinese) [孟祥建等 2000 物理学报 **49** 371]
 [8] Perichon S, Lysenko V, Remaki B, Barbier D and Champagnon B 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 4700
 Wornier E, Wagner J, Muller-Sebert W, Wild C, Koidi P 1996 *Appl. Phys. Lett.* **68** 1482
 [9] Graebner J E, Reiss M E, Seibles L, Hartnett T M, Miller R P and Robinson C J 1994 *Phys. Rev.* **B50** 3702

- [10] Baglio J A ,Gashurov G 1968 *Acta Cryst.* **B24** 292
- [11] Hahn T 1983 *The International Tables for Crystallography* (Vol. A , Dordrecht/Boston) p472
- [12] Zhang G Y ,Lan G X 1991 *Lattice Vibration Spectroscopy* (Beijing : Higher Education Publishing House) p213 [in Chinese] 张光寅、蓝国祥 1991 晶格振动光谱学(北京 :高等教育出版社)第 213 页]
- [13] Weinstock N ,Schulze H and Muller A 1973 *J. Chem. Phys.* **59** 5063
- [14] Xia H R *et al* 1996 *Acta Phys. Sin.* **45** 232 (in Chinese) 夏海瑞等 1996 物理学报 **45** 232]
- [15] Rao C N R 1963 *Chemical Application of Infrared Spectroscopy* (Academic Press) 23
- [16] Schwartz J W and Walker C T 1967 *Phys. Rev.* **155** 969
- [17] Wang R J *et al* 2000 *Chinese Journal of Lasers* **27** 449 (in Chinese) [王汝菊等 2000 中国激光 **27** 449]
- [18] Nakamoto K 1978 *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds* (Third Edition ,John Wiley & Son) p83

Raman spectra investigation of Nd-doped zircon-type laser crystal

Lu Gui-Wu¹⁾ Xia Hai-Rui¹⁾ Meng Xian-Lin²⁾ Liu Xue-Song²⁾ Yang Wei-Bing³⁾

¹⁾(*Department of Physics ,Shandong University ,Jinan 250100 ,China*)

²⁾(*Institute of Crystal Materials ,Shandong University ,Jinan 250100 ,China*)

³⁾(*Logging Corporation ,Shengli Oil Field ,Dongying 257062 ,China*)

(Received 8 May 2001 ; revised manuscript received 9 June 2001)

Abstract

The Raman spectra of neodymium-doped yttrium orthovanadate Nd :YVO₄(NYV) and neodymium-doped gadolinium orthovanadate Nd :GdVO₄(NGV) have been measured at 500K with different geometrical configurations. On the basis of the group theory and lattice dynamics theory ,all the Raman peaks are assigned ,and a correlation between the thermal conductivity and the Raman scattering strength is given in this paper. The thermal conductivity of Nd :GdVO₄ and Nd :YVO₄ crystals along [110] and [101] directions are calculated and a good agreement with experimental results is obtained. The higher thermal conductivity of NGV crystals is mainly attributed to the increase of atom mass and radius compared with NYV crystal ,which in return ,enhances the crystal field strength of the laser crystal.

Keywords : Raman spectra , laser crystal , thermal conductivity , space group

PACC : 7830 , 8100F