

Bi₂ZnOB₂O₆ 单晶偏振拉曼光谱*张季^{1)2)†} 张德明¹⁾ 王迪¹⁾ 张庆礼¹⁾ 孙敦陆¹⁾ 殷绍唐¹⁾

1) (中国科学院安徽光学精密机械研究所, 合肥 230031)

2) (安徽新华学院, 合肥 230088)

(2013年8月19日收到; 2013年9月2日收到修改稿)

本文通过分析不同几何配置下的偏振拉曼光谱对非线性光学晶体的晶格振动模式进行了研究. 首先根据因子群分析, 将晶体的振动模按晶体对称群的不可约表示进行分类, 其次测量了晶体在 10—1600 cm⁻¹ 范围内, 不同几何配置下的偏振拉曼光谱, 并在此基础上指认了晶体的晶格振动模式. 300 cm⁻¹ 以下的振动峰, 归结为晶体的外振动, 来自 [BiO₆], [ZnO₄], [BO₄] 和 [BO₃] 原子基团的平动和转动; 300cm⁻¹ 以上为晶体的内振动, 主要与 Bi-O, 和 Zn-O 键振动有关. 晶体拉曼光谱中最高振动频率达到 1407 cm⁻¹, 被指认为 [BO₃] 三角形中 B-O 键的伸缩振动, 体现了 [BO₃] 基团中高的电子非局域化程度.

关键词: Bi₂ZnOB₂O₆ 单晶, 偏振拉曼光谱, 振动模式

PACS: 78.30.Er, 61.50.Ah, 63.20.Dj

DOI: 10.7498/aps.62.237802

1 引言

Bi₂ZnOB₂O₆ 晶体是既二元铋硼酸盐晶体 (如 BiB₃O₆) 之后发现的黄长石型三元铋硼酸盐, 因其具有优良的光学非线性而引起人们浓厚的研究兴趣. 铋硼酸盐 Bi₂ZnOB₂O₆ 首次由 Jacques 等人用固相合成法在 1 atm (1 atm = 1.01325 × 10⁵ Pa) 和 650 °C 条件下得到^[1]. 其后, Li 等人通过高温熔体法生长出大尺寸 Bi₂ZnB₂O₇ 单晶^[2-4], 他们发现此晶体具有诸多优良特性, 如高的二次倍频效应, 宽的相位匹配范围和不潮解等, 将成为新型的功能晶体材料.

近些年来, 实验和理论研究除了关注于 Bi₂ZnOB₂O₆ 晶体的非线性特性, 生长方法, 密度, 硬度和热力学性质等方面^[5,6], 也有研究报道了晶体微观结构与晶体倍频效应的关系. 类如非线性光学晶体 BiB₃O₆ 的二次倍频效应主要来自 BiO_n 配位多面体^[7-11], Boudia 等人通过第一性原理计算阐释了 Bi₂ZnOB₂O₆ 晶体中 BiO_n 基团对晶体光学性质的影响^[12]; 根据阴离子基团理论, BO₃ 离子

基团对晶体的光学倍频效应则有更大的贡献^[13]. 获得准确的离子基团结构信息是研究其倍频效应的基础, 而拉曼光谱学是研究晶体微观结构和离子基团振动的有效手段^[14,15], 据我们所知, 关于 Bi₂ZnOB₂O₆ 晶体拉曼光谱的研究未见报道. 本文通过因子群分析方法给出了晶体布里渊区中心点晶格振动模对称性的不可约表示, 获得了不同几何配置下的拉曼光谱, 并在此基础之上对该晶体晶格振动模进行了指认归属.

2 晶体结构与因子群分析

Bi₂ZnOB₂O₆ 晶体的微观结构先后由 Barbier Li 等人通过 X 射线衍射的光谱结果分析得到^[1,2]. 该晶体属于黄长石型硼酸盐晶体, 具有 C_{2v}⁸-Pba2 空间群对称性. 晶体沿着 (001) 面方向, Zn 和 B 原子通过共氧的形式相互连接构成层状的二维结构; 六配位的 Bi³⁺ 把层与层通过 Bi-O 键连接成三维晶体框架, 如图 1 所示. 层状结构还可以细分, 其中两个 [BO₃]³⁻ 硼氧三角形通过一个氧桥形成 [B₂O₅]⁴⁻ 离子基团; 两个 [BO₄]⁵⁻ 硼氧四面体通过

* 国家自然科学基金 (批准号: 50932005, 51102239, 90922003, 51172236, 91122021) 和安徽省自然科学基金 (批准号: KJ2013B106) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: 18956063545@189.cn

一个氧桥形成 $[B_2O_7]^{8-}$ 离子基团; 两种离子基团再由 $[ZnO_4]^{6-}$ 通过三个桥氧连接. 总体来看, 构成晶体的基本结构基元为 $[BO_3]$ 三角形、 $[BO_4]$ 四面体、 $[ZnO_4]$ 四面体和 $[BiO_6]$ 畸变八面体.

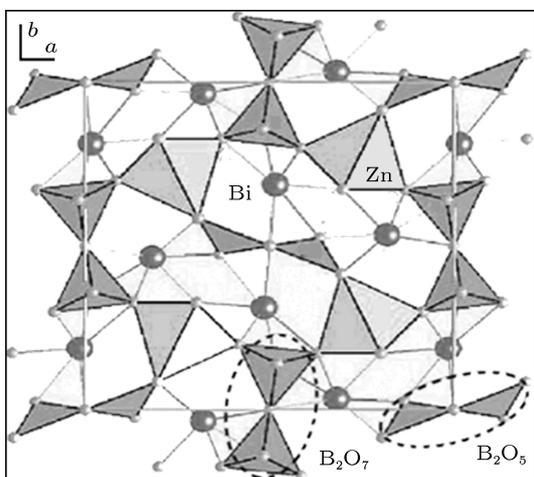


图1 $Bi_2ZnOB_2O_6$ 晶体沿 $[001]$ 方向观察的结构示意图

$Bi_2ZnOB_2O_6$ 晶体属于正交晶系, 其中每个单胞中包含 4 个化学式单元, 共 48 个原子, 共有 144 个晶格振动模, 根据因子群分析^[16], 布里渊区中心点晶格振动模的对称性分类为

$$\Gamma = 29A_1 + 41A_2 + 37B_1 + 37B_2,$$

属于 A_1, B_1, B_2 表示的振动模为拉曼活性和红外活性, 属于 A_2 表示的振动模仅为拉曼活性. 在晶体的 144 个振动模式中, 3 个振动模式 ($A_1 + B_1 + B_2$) 为声学振动模, 其余为光学振动模. 因此在 $Bi_2ZnOB_2O_6$ 晶体的拉曼散射光谱中最多可以观测到 141 个拉曼振动峰. 取 Z 轴平行于晶体的二次旋转轴, 所对应每一个表示的拉曼散射张量为

$$A_1(z) = \begin{bmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & c \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} 0 & d & 0 \\ d & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$B_1(x) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & e \\ 0 & 0 & 0 \\ e & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad B_2(y) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & f \\ 0 & f & 0 \end{bmatrix}.$$

根据以上所列出的拉曼散射张量, 选择合理的几何配置, 可以对晶体的拉曼振动模式进行选择性地激发, 从而得到晶体的偏振拉曼光谱.

3 实验部分

实验所用样品是由新疆理化所用熔体法生长的优质 $Bi_2ZnOB_2O_6$ 单晶. 晶体经定向、切割、抛光加工成的 $7\text{ mm} \times 5\text{ mm} \times 5\text{ mm}$ 的块状样品. 采用笛卡尔坐标系使得 $x//[100], y//[010], z//[001]$, 方向偏差小于 1. 实验测试仪器为中科院强磁场中心的 Horiba JYT64000 型共焦拉曼光谱仪, 配有 $50\times$ 光学显微镜头和偏振装置. 激发波长 532 nm , 输出功率 800 mW , 单色仪最大分辨率 0.2 cm^{-1} , 扫描范围 $10\text{--}1600\text{ cm}^{-1}$. 实验光路采用背散射共聚焦收集系统, 散射光聚焦于狭缝宽度为 $300\text{ }\mu\text{m}$ 的单色仪狭缝上. 样品根据表 1 列出的几何配置方案平行放置在样品台上, 信号采集时间为 80 s , 采集到不同几何配置下的偏振拉曼光谱. 在 $Bi_2ZnOB_2O_6$ 多晶拉曼光谱的测量过程中, 先将晶体在玛瑙研钵中磨成多晶粉末, 放置在载玻片上压平, 然后去掉光路中的偏振装置, 其他测试条件不变, 最后得到晶体的多晶拉曼光谱.

表 1 激发模式与采用的几何配置

振动模式	几何配置
A_1	$y(xx)\bar{y}, x(yy)\bar{x}, y(zz)\bar{y}$
A_2	$z(xy)\bar{z}, z(yx)\bar{z}$
B_1	$y(xz)\bar{y}, y(zx)\bar{y}$
B_2	$x(yz)\bar{x}, x(zy)\bar{x}$

4 结果与讨论

图 2 显示了室温下测量的在 $10\text{--}1600\text{ cm}^{-1}$ 范围内的 $Bi_2ZnOB_2O_6$ 多晶拉曼光谱, 从谱图中可以看出大部分振动峰集中分布在 300 cm^{-1} 以下, 且相对强度较强. 由于多晶拉曼光谱是把晶体所有振动模式都激发出来相互叠加的结果, 所以出现很宽的包络, 而在不同几何配置下得到的偏振拉曼光谱可以把不同模式分别激发出来以提高拉曼振动峰的辨识度. 图 3 显示了在 $y(xx)\bar{y}, x(yy)\bar{x}, y(zz)\bar{y}$ 几何配置下得到的 $Bi_2ZnOB_2O_6$ 单晶 A_1 模的拉曼光谱. 在因子群分析中 A_1 模式预计有 29 个振动, 实验中观察到了 27 个, 其中最强振动位于 78 cm^{-1} 处, 其相对振动峰强是次强振动的 6 倍且谱峰细锐. 值得注意的是, 在 30 以下的低频区观察到了随频率增加强度递减且频率间隔基本相同的一个振动峰簇, 这些振动峰在其他模式的拉曼光谱中并未出现, 因

此可以把这一簇振动峰看成 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 单晶 A_1 模式的特征振动峰. 此外, $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 单晶 A_2 , B_1 和 B_2 模的拉曼光谱分别显示在图 4、图 5 和图 6 中. 从观察到的振动数目来看, A_2 模式中观察到 18 个振动峰, B_1 模式中观察到 20 个振动峰, B_2 模式中观察到 21 个振动峰, 拉曼峰数目均少于因子群理论分析的结果.

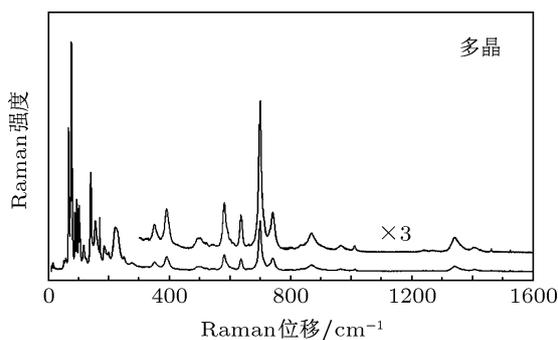


图 2 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 多晶拉曼光谱

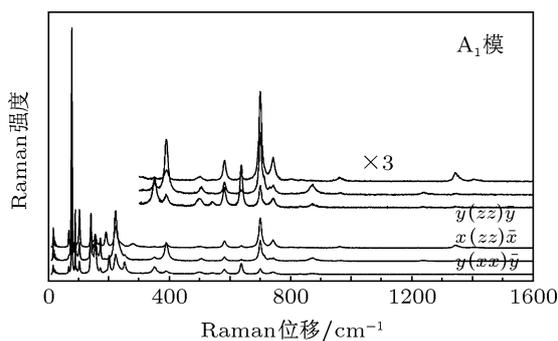


图 3 在 $y(xx)\bar{y}$, $x(yy)\bar{x}$, $y(zz)\bar{y}$ 几何配置下的 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 单晶偏振拉曼光谱

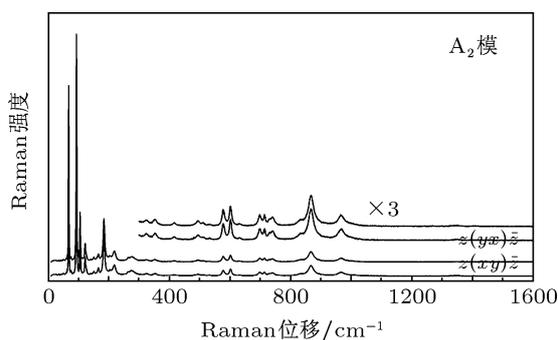


图 4 在 $z(xy)\bar{z}$, $z(yx)\bar{z}$ 几何配置下的 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 单晶偏振拉曼光谱

在分子晶体中, 分子的平动, 转动以及相互作用都会表现为低频振动 (外振动). 分子内部原子间的振动多出现在光谱的高频区, 离子共价键晶体也会出现类似的现象. 对于 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 晶体, 在其多晶拉曼光谱中这种现象表现的十分明

显. 以 300 cm^{-1} 为分界线, 300 cm^{-1} 以下的低频区, 谱线密集, 因重合而形成包络, 而在 300 cm^{-1} 以上区域拉曼峰之间间距较大, 且峰型完整. 特别地, 在图 3 显示的拉曼光谱中, 300 cm^{-1} 以下的低频区, 观察到分界明显的振动峰簇, 分别位于 $10\text{--}40\text{ cm}^{-1}$, $63\text{--}113\text{ cm}^{-1}$, $131\text{--}179\text{ cm}^{-1}$ 和 $194\text{--}270\text{ cm}^{-1}$ 频率区间内, 可能是由于晶体中四种不同离子基团, 即 $[\text{BiO}_6]$, $[\text{ZnO}_4]$, $[\text{BO}_4]$ 和 $[\text{BO}_3]$, 整体转动和平动的结果. 因此可以把 300 cm^{-1} 以下的振动归结为晶体的外振动.

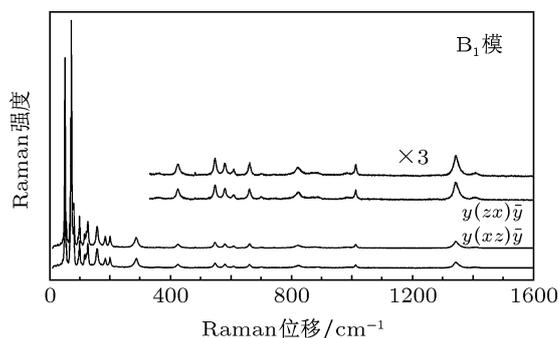


图 5 在 $y(xz)\bar{y}$, $y(zx)\bar{y}$ 几何配置下的 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 单晶偏振拉曼光谱

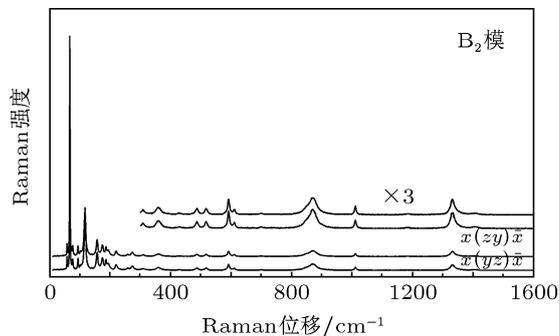


图 6 在 $x(yz)\bar{x}$, $x(zy)\bar{x}$ 几何配置下的 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 单晶偏振拉曼光谱

在 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 晶体结构中, 六配位的 Bi 与周围的氧原子构成畸变的八面体. Baia 等人在研究 $\text{B}_2\text{O}_3\text{--Bi}_2\text{O}_3$ 玻璃的拉曼光谱中发现, BiO_6 八面体中的 Bi-O 键振动峰位于 $200\text{--}550\text{ cm}^{-1}$ 和 880 cm^{-1} 处 [17]; 350 cm^{-1} 的振动峰在 $\text{Bi}_2\text{O}_3\text{--ZnO--B}_2\text{O}_3$ 玻璃的拉曼光谱中被观察到, 被指认为 Bi-O-Bi 键的振动 [18]; 在对 Bi_2TeO_5 晶体拉曼光谱的研究中, Domoratski 把 519 和 625 cm^{-1} 的振动指认为铋氧八面体中的 Bi-O 振动 [19]. 因此, 在 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 晶体的拉曼光谱中, 350 , 516 , 637 和 873 cm^{-1} 振动峰应与 BiO_6 八面体中的 Bi-O 键振动有关.

表 2 Bi₂ZnOB₂O₆ 晶体偏振拉曼光谱振动频率及晶格内、外振动模式指认

$y(xx)\bar{y}$	不同几何配置下的拉曼频移/cm ⁻¹					振动模式指认
	$x(yy)\bar{x}$	$y(zz)\bar{y}$	$z(xy)\bar{z}$	$y(xz)\bar{y}$	$x(yz)\bar{x}$	
16 m	16 m	17s				
19 m	19 m	19 m				
22w	22w	23w				
25vw	25vw			51vs		
				56w	57m	晶体中 [BiO ₆],
67m		67s	67vs		67vs	[ZnO ₄], [BO ₄]
78vs	78vs	78vs		72vs	78m	和 [BO ₃] 基团的
89s	89s	89m	94vs	80s		转动与平动
102m	102m	102vs	105s	99m	102w	
141vs	141s	141s	123m	127m	117s	
155s		155m	150vw	157w	157m	
172vw	172m	191m	166w	184vw	175m	
					186m	
201m				200vw	193w	
223m	223s	223s	219w		220w	
250m		279w	274w	286vw	275w	
349m	349m		354vw		359v	Bi-O in [BiO ₆]
388w		391w				B-O in [BO ₄]
			415vw	423w	427vw	Zn-O in [ZnO ₄]
499w	506w	501vw	511vw		516vw	Bi-O in [BiO ₆]
543vw			578w	547w		B-O in [BO ₄]
582m	582w	582m		580w	591w	Zn-O in [ZnO ₄]
637m	637vw		602w	661w	610vw	Bi-O in [BiO ₆]
						B-O in [BO ₃]
700m	700m	700vs	700vw		700vw	B-O in [BO ₃]
742w	743w	742m	742vw			B-O in [BO ₃]
832vw		802vw	833vw	823w		B-O in [BO ₄]
871vw	873w		869w	887vw		Bi-O in [BiO ₆]
	964vw	960vw	968vw	984vw		B-O in [BO ₃]
				1010w	1010vw	B-O in [BO ₄]
	1238w				1183vw	B-O-B
	1345vw	1344w		1340w	1331w	B-O in [BO ₃]
		1404vw		1407vw	1404vw	B-O in [BO ₃]

强度: vs (very strong); s (strong); m (middle); w (weak); vw (very weak).

Bi₂ZnOB₂O₆ 晶体结构中, 存在两个硼氧基团, 即 B₂O₇ 和 B₂O₅, 在晶格中处于一般位置^[1]. 其中 B₂O₇ 离子基团由两个公顶点的 [BO₄] 四面体组成, B-O 平均键长 1.49 Å, 这样的离子基团也存在于 Li₂B₄O₇ 结构中^[20]; B₂O₅ 离子基团则由两个公顶点的 [BO₃] 平面三角形组成, B-O 平均键长 1.35 Å.

若按照以上的结构模型分析, 根据基团内振动相关表 3, 可以看出, 它们的内振动模式均匀的分布于 A₁, A₂, B₁ 和 B₂ 模式中. 众所周知, [BO₄] 四面体具有 T_d 点群对称性, 存有四个简正振动模, 对应的频率分别为: ν₁(A₁) 约 800—955 cm⁻¹(对称伸缩振动), ν₂(E) 约 400—600 cm⁻¹(弯曲振动), ν₃(F₂)

约 1000 cm^{-1} (伸缩振动), $\nu_4(F_2)$ 约 600 cm^{-1} (反对称伸缩振动)^[21-23]. 在 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 晶体拉曼谱中, 位于 $388, 391, 547\text{ cm}^{-1}$ 的拉曼峰与 $[\text{BO}_4]$ 四面体中 B-O 弯曲振动有关; $823, 833\text{ cm}^{-1}$ 来自 B-O 键的对称伸缩振动; 1010 cm^{-1} 的振动峰被认为来自 $[\text{BO}_4]$ 基团中的 B-O 伸缩振动. 另一方面, $[\text{BO}_3]$ 三角形具有 D_{3h} 点群对称性, 它的四个简正模对应的频率为: $\nu_1(A'_1)$ 约 950 cm^{-1} (对称伸缩振动), $\nu_2(A''_2)$ 约 $650\text{--}800\text{ cm}^{-1}$ (面外弯曲振动), $\nu_3(E')$ 约 $1100\text{--}1300\text{ cm}^{-1}$ (反对称伸缩振动), $\nu_4(E')$ 约 $500\text{--}600\text{ cm}^{-1}$ (面内弯曲振动)^[24,25]. 位于 $602, 661, 700, 742\text{ cm}^{-1}$ 的振动与 $[\text{BO}_3]$ 的 B-O 弯

曲振动, $960, 984, 1183\text{--}1407\text{ cm}^{-1}$ 的拉曼峰则来自 $[\text{BO}_3]$ 基团中的 B-O 伸缩振动. 其中, 1183 和 1238 cm^{-1} 振动峰对应于 $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7$ 晶体的拉曼光谱中的位于 1178 和 1285 cm^{-1} 两个振动峰^[26], 它们与 B-O-B 桥氧振动有关. 值得注意的是, 最高振动频率的拉曼峰位于 1407 cm^{-1} 处, 被认为 B-O 伸缩振动. 高频率的振动特征也反映了三配位硼氧基团桥键中的电子非局域化的程度较高, 这也是导致晶体非线性光学系数较大的重要原因之一^[27]. 最后, 由于 $[\text{BO}_4]$ 四面体和 $[\text{BO}_3]$ 三角形的内振动频率在 $500\text{--}1100\text{ cm}^{-1}$ 区域发生重叠, 因此很难把他们的振动峰全部区分清楚.

表3 $[\text{BO}_4]$ 和 $[\text{BO}_3]$ 基团内振动模式相关表

[BO ₄] 四面体			[BO ₃] 平面三角形		
分子对称性	位置对称性	因子群	分子对称性	位置对称性	因子群
T_d	C_1	C_{2v}	D_{3h}	C_1	C_{2v}
A_1	A	$A_1 + A_2 + B_1 + B_2$	A'_1	A	$A_1 + A_2 + B_1 + B_2$
E	2A	$2(A_1 + A_2 + B_1 + B_2)$	A''_2	A	$A_1 + A_2 + B_1 + B_2$
F_2	3A	$3(A_1 + A_2 + B_1 + B_2)$	E'	2A	$2(A_1 + A_2 + B_1 + B_2)$

除了铋氧基团与硼氧基团外, 在 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 的晶体结构中, Zn-O 键起到了连接硼氧基团的作用. 在 ZnO 晶体的拉曼光谱中^[28], Zn-O 键的振动频率位于 $380, 437, 583\text{--}670\text{ cm}^{-1}$ 频率区间. 在 $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ 的拉曼光谱中, 与之对应的振动频率位于 $415, 423, 578\text{--}591\text{ cm}^{-1}$ 处.

5 结论

本文首先通过因子群分析方法给出了 Bi_2ZnO

B_2O_6 晶体布里渊区中心点晶格振动模对称性的不可约表示, 其次测量了晶体在不同的几何配置下的偏振拉曼光谱, 并在此基础之上对该晶体晶格振动模进行了指认归属. 波数在 300 cm^{-1} 以下的振动归结为晶体的外振动, 主要来自 $[\text{BiO}_6]$, $[\text{ZnO}_4]$, $[\text{BO}_4]$ 和 $[\text{BO}_3]$ 等原子基团整体的转动和平动; 300 cm^{-1} 以上的拉曼峰被认为晶体的内振动, 与上述离子基团中的 Bi-O, B-O 和 Zn-O 键振动有关.

- [1] Barbier J, Penin N, Cranswick L M 2005 *Chem. Mater.* **17** 3130
- [2] Li F, Pan S L, Hou X L, Yao J 2009 *Cryst. Growth Des.* **9** 4091
- [3] Li F, Hou X L, Pan S L, Wang X A 2009 *Chem. Mater.* **21** 2846
- [4] Li F, Fu P Z, Wu Y C, Zhang J X 2009 *J. Cryst. Growth* **311** 3476
- [5] Li F, Pan S, Hou X, Zhou Z 2010 *J. Cryst. Growth* **312** 2383
- [6] Zhang Q H, Wang J, Ni H, Wang L 2012 *Rare Metals* **31** 35
- [7] Reshak H, Auluck S, Majchrowski A, Kityk I V 2009 *Jpn. J. Appl. Phys. Part 1* **48** 011601
- [8] Majchrowski A, Gondek E, Ozga K, Kityk I V, Reshak A H, Kasiewicz T 2009 *J. Alloys Compd.* **485** 29
- [9] Weglowski S, Klosowicz S J, Majchrowski A, Tkaczyk S, Reshak A H, Pisarek J, Kityk I V 2010 *Mater. Lett.* **64** 1176
- [10] Majchrowski S, Ebothe J, Ozga K, Kityk I V, Reshak A H, Łukasiewicz T, Brik M G 2010 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **43** 015103
- [11] Majchrowski S, Ebothe J, Sanetra J, Ozga K, Kityk I V, Reshak A H, Łukasiewicz T 2010 *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.* **21** 726
- [12] Merad B I, Reshak A H, Ouahrani T, Bentalha Z 2013 *J. Appl. Phys.* **113** 083505
- [13] Chen C T 1979 *Sci. Sin.* **22** 759
- [14] Zhang J, Wang D, Zhang D M, Zhang Q L, Wan S M, Sun D L, Yin S T 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 037802 (in Chinese) [张季, 王迪, 张德明, 张庆礼, 万松明, 孙敦陆, 殷绍唐 2013 物理学报 **62** 037802]
- [15] Wang D, Wan S M, Zhang Q L, Sun D L, Gu G X, Yin S T, Zhang G C, You J L, Wang Y Y 2011 *Chin. Phys. B* **10** 108101
- [16] Zhang G Y 2001 *Lattice vibrational spectroscopy* (Higher Education Press) p200 (in Chinese) [张光寅 2001 晶格振动光谱学 (高等教育出版社) 第 200 页]
- [17] Baia L, Stefan R, Kiefer W, Simon S 2005 *J. Raman Spectrosc.* **36** 262
- [18] Inoue T, Honmaa T, Dimitrov V, Komatsu T 2010 *J. Solid State Chem.* **183** 3078

- [19] Domoratski K V, Pastukhov V I, Kudzin A Y, Ya L Sadovskaya, Rizak V M, Stefanovich V A 2001 *Phys. Solid State* **42** 1443
 [20] Krogh-Moe J 1962 *Acta Crystallogr.* **15** 190
 [21] Kamitsos E I, Karakassides M A, Chryssikos G D 1989 *Phys. Chem. Glasses* **30** 229
 [22] Heyns A M, Range K J, Wildenauer M 1990 *Spectrochimica Acta A* **46** 1621
 [23] Jiang Y J, Wang Y, Zeng K Z, Liu Y L 1996 *Acta Phys. Sin.* **45** 885
 (in Chinese) [蒋毅坚, 王越, 曾令扯, 刘玉龙 1996 物理学报 **45** 885]
 [24] Paul G L, Taylor W 1956 *J. Phys.* **25** 1184
 [25] Steele W C, Decius J C 1956 *J. Chem. Phys.* **25** 1184
 [26] Kaminskiia A A, Beckerb P, Bohatyb L, Uedac K, Takaichic K, Hanuzad J, Maczkad M, Eichlerf H J, Gad M A 2002 *Optics Communications* **206** 179
 [27] Shang Q Y, Hudson B S, Huang C 1991 *Spectrochim Acta. A* **47** 291
 [28] Damen T C, Pqrtq S P S, Tell B 1966 *Phys. Rev.* **142** 570

Polarized Raman spectra of single crystal $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6^*$

Zhang Ji^{1)2)†} Zhang De-Ming¹⁾ Wang Di¹⁾ Zhang Qing-Li¹⁾
 Sun Dun-Lu¹⁾ Yin Shao-Tang¹⁾

1) (Anhui Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China)

2) (An Hui Xin Hua University, Hefei 230088, China)

(Received 19 August 2013; revised manuscript received 2 September 2013)

Abstract

Polarized Raman spectra of single crystal $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$ have been recorded in the spectral range 10–1600 cm^{-1} at room temperature. Factor group analysis was used to obtain the normal modes of vibration of the crystal. The Raman peaks under 300 cm^{-1} are assigned to external modes, which are related to the rotational and transitional movement of the $[\text{BiO}_6]$, $[\text{ZnO}_4]$, $[\text{BO}_4]$ and $[\text{BO}_3]$ groups. Compared with the vibrational spectra of the compounds referred, the satisfactory assignment of most of the high-energy modes to vibrations of Bi-O, B-O and Zn-O bonds can be achieved. In particular, the Raman high-frequency peak located at 1407 cm^{-1} is attributed to the B-O vibration in the $[\text{BO}_3]$ triangle.

Keywords: single crystal $\text{Bi}_2\text{ZnOB}_2\text{O}_6$, Raman spectroscopy, vibration mode

PACS: 78.30.Er, 61.50.Ah, 63.20.Dj

DOI: 10.7498/aps.62.237802

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 50932005, 51102239, 90922003, 51172236, 91122021) and the Natural Science Foundation of Anhui Province, China (Grant No. KJ2013B106).

† Corresponding author. E-mail: 18956063545@189.cn