



Базовая кафедра квантовых
технологий при Институте общей
физики РАН

29 декабря 2022 г.

Ниобат лития LiNbO_3

Моделирование основного состояния ферроэлектрической фазы и
вычисление энтальпии образования

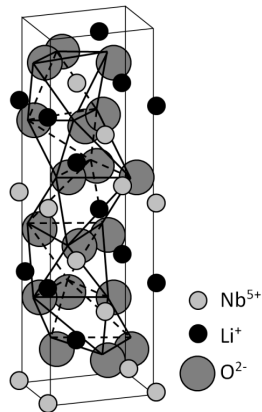
Винецкая Полина



Ниобат лития LiNbO_3

Физические свойства

- Тригональная сингония,
кристаллографическая точечная группа
 $3m$ (C_{3v})
(дитригонально-пирамидальная)
- Отсутствие центральной симметрии
- Сегнетоэлектрик
- Широко используется в оптике в
качестве полосовых фильтров,
модуляторов, линий задержки и т.д.



Crespillo, Miguel & Graham, Joseph & Agullo-Lopez, Fernando & Yanwen, Zhang & Weber, William. (2021). Real-Time Identification of Oxygen Vacancy Centers in LiNbO_3 and SrTiO_3 During Irradiation with High Energy Particles. *Crystals*. 11. 315. 10.3390/cryst11030315.



Ниобат лития LiNbO_3

Моделирование

Слева представлены результаты, полученные в статье¹, справа – визуализация полученных результатов. Атомы Li черные, Nb серые, и O светло-серые.

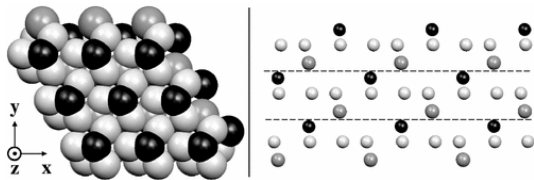


Рис.: Поверхность (0001) ниобата лития (слева) и слои (справа) с нормалью вдоль оси z



Рис.: Поверхность (0001)

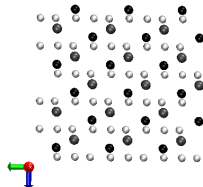


Рис.: Слои с нормалью вдоль оси z

¹Levchenko SV, Rappe AM. Influence of ferroelectric polarization on the equilibrium stoichiometry of lithium niobate (0001) surfaces. Phys Rev Lett. 2008 Jun 27;100(25):256101.



Ниобат лития LiNbO_3

Эксперимент

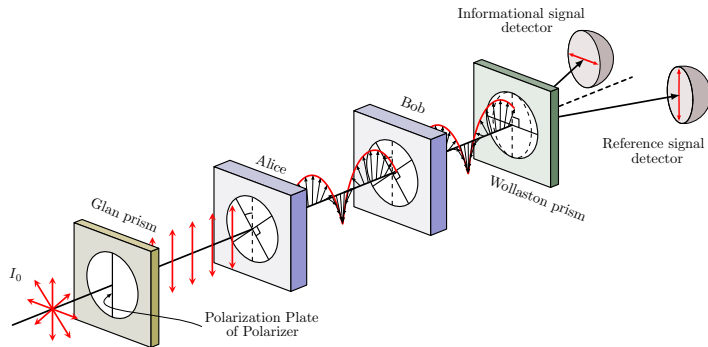


Рис.: Упрощенная схема установки



Энтальпия образования

Количество теплоты, которое поглощается (если энтальпия образования положительна) или выделяется (если энтальпия образования отрицательна) при образовании сложного вещества из простых веществ. В общем случае считается по формуле:

$$\Delta H(A_X B_Y) = E_{AB} - XE_A - YE_B \quad (1)$$

	Эксперимент	Результат статьи 1 ²	Результат статьи 2 ³	Полученный результат
LiNbO ₃	-13.87	-14.1	-14.62	-14.47
Nb ₂ O ₅	-19.75		-20.25	-20.68
Li ₂ O	-6.23	-6.2	-6.24	-6.13

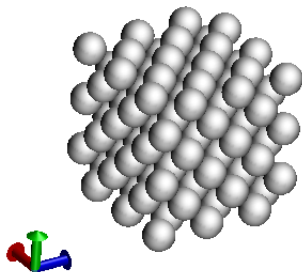
²Levchenko SV, Rappe AM. Influence of ferroelectric polarization on the equilibrium stoichiometry of lithium niobate (0001) surfaces. Phys Rev Lett. 2008 Jun 27;100(25):256101.

³Sanna S, Schmidt WG. LiNbO₃ surfaces from a microscopic perspective. J Phys Condens Matter. 2017 Oct 18;29(41):413001.



Моделирование кристалла Литий

- При комнатной температуре имеет решетку ОЦК
- В основном состоянии решетка гексагональная плотноупакованная

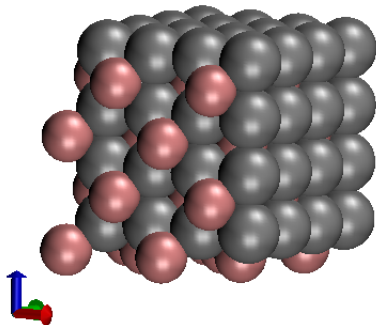




Моделирование кристалла

Оксид Лития (II) Li_2O

- Кубическая ОЦК решетка

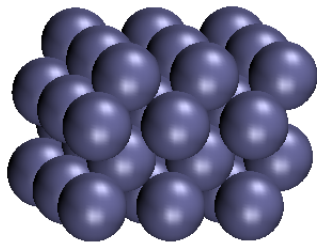




Моделирование кристалла

Ниобий

- Кубическая ОЦК решетка

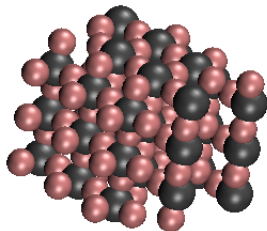




Моделирование кристалла

Оксид ниобия (V) Nb_2O_5

- Имеет множество кристаллических модификаций
- Моноклинная сингония





- Результаты вычислений неплохо согласуются с результатами, описанными в статье
- Ассиметрия решетки ниобата лития объясняет нелинейные электрооптические эффекты