

А. В. Денисов, Ю. О. Пунин, А. Г. Штукенберг, О. С. Грунский

ИССЛЕДОВАНИЕ ОПТИЧЕСКИХ АНОМАЛИЙ И РАСЧЕТ ВНУТРЕННИХ НАПРЯЖЕНИЙ В КРИСТАЛЛАХ МОЛИБДАТА СВИНЦА, ВЫРАЩЕННЫХ МЕТОДОМ ЧОХРАЛЬСКОГО¹

Кристаллы, выращиваемые методом Чохральского, очень часто имеют выпуклую межфазную границу. Считается, что это создает условия для возникновения термопластических напряжений в кристалле, которые резко снижают качество кристаллов и могут приводить к их растрескиванию. Однако остаточные напряжения в кристаллах группы шеелита, выращиваемых из расплава, практически не изучены, хотя специфика теплоотвода при росте этих кристаллов (большой вклад радиационного теплоотвода через кристалл) должна приводить и к особому распределению напряжений.

В данной работе рассмотрена методика анализа термопластических напряжений на примере монокристаллов молибдата свинца ($PbMoO_4$). Термопластические напряжения в кристаллах средних сингоний достаточно легко исследовать поляризационно-оптическим методом в разрезах, перпендикулярных оси Z , в сходящемся поляризованном свете (метод коноскопии). Кристаллы средних сингоний в идеальных условиях являются одноосными, но под действием напряжений приобретают аномальную двусосность. Величина расхождения изогир (угол $2V$) характеризует максимальные скалывающие напряжения (разность квазиглавных напряжений) в срезе, а ориентировка плоскостей оптических осей (ПОО) – траектории квазиглавных нормальных напряжений.

Из кристаллов $PbMoO_4$, выращенных вдоль оси X или Z , были вырезаны и отполированы пластины толщиной 5 мм, перпендикулярные оси Z . Коноскопические картины наблюдали с помощью поляризационного микроскопа МП-2, с шестикратно увеличивающим окуляром с микрометренной линейкой и восьмикратно увеличивающим объективом. Распределение по площади пластин аномальной двусосности изучали по квадратной сетке со стороны 2 мм. Определяли угол между оптическими осями $2V$ (по расхождению гипербол), используя методику, описанную в [1], и угол наклона плоскости оптических осей к продольной оси X пластины (γ) (рис. 1).

Напряжения рассчитывали в специальной системе координат: ось X_3 – по направлению просвечивания (параллельно оси L_4), а оси X_1 и X_2 – по направлению вытягивания (длина сечения) и по нормали к нему в плоскости сечения (ширина сечения). Так как вытягивание производится в направлении кристаллографической оси X , то в данном случае специальная система координат совпадает с кристаллографической, а вследствие тетрагональности кристалла – и с кристаллофизической ($X_1 \parallel X, X_2 \parallel Y, X_3 \parallel Z$). Для кристаллов, выращенных по оси L_4 , сечения перпендикулярны к направлению вытягивания, которое совпадает с направлением просвечивания X_3 . Вычислив угол $2V$ и измерив угол наклона плоскости оптических осей к оси X_1 (γ), определяем разность квазиглавных напряжений и угол наклона их траекторий к оси X_1 [2]. Из величины угла оптических осей рассчитываем разность главных компонент двумерного тензора диэлектрической непроницаемости

$$\eta_{(1)} - \eta_{(2)} = \operatorname{tg}^2 V (n_e^{-2} - n_o^{-2}),$$

которая получена из выражения

$$\operatorname{tg} V = \sqrt{\frac{\eta_{(1)} - \eta_{(2)}}{n_e^{-2} - n_o^{-2}}},$$

где n_o, n_e – показатели преломления.

Из полученной разности главных компонент и угла наклона ПОО к оси X_1 высчитываем разность компонент тензора диэлектрической непроницаемости ($\eta_{(1)} - \eta_{(2)}$) и компоненту (η_6) в кристаллофизической системе координат, используя формулы

$$\operatorname{tg} 2\gamma = 2 \frac{\eta_6}{\eta_1 - \eta_2},$$

$$\eta_{(1)} - \eta_{(2)} = \sqrt{(\eta_1 - \eta_2)^2 + 4\eta_6^2}.$$

¹ Работа частично выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 05-05-64289) и ведомственной научной программы «Развитие научного потенциала высшей школы» по проекту «Исследование условий получения и реальной структуры кристаллов группы шеелита».

© А. В. Денисов, Ю. О. Пунин, А. Г. Штукенберг, О. С. Грунский, 2006

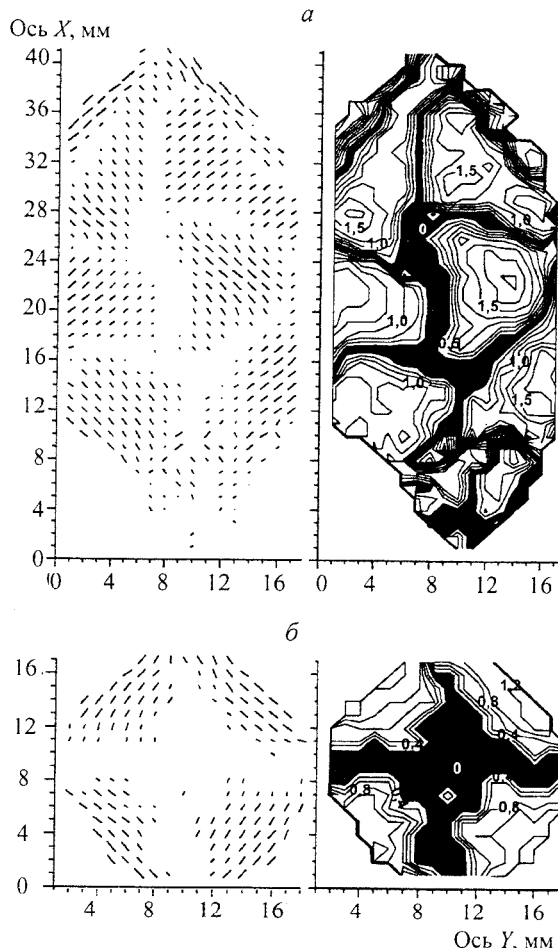


Рис. 1. Наклон ПОО в срезе и значения $2V$.
 а – кристалл вытягивался вдоль оси Y ; б – кристалл вытягивался вдоль оси Z (то же для рис. 4).

Тензора упругой податливости ($c_{\lambda\mu}$) и упругооптических коэффициентов ($p_{\lambda\mu}$)

$\lambda\mu$	$c_{\lambda\mu} \cdot 10^{11}$	$p_{\lambda\mu}$	$\lambda\mu$	$c_{\lambda\mu} \cdot 10^{11}$	$p_{\lambda\mu}$
11	1,092	0,24	32	0,528	0,175
12	0,683	0,24	33	0,917	0,3
13	0,528	0,255	44	0,267	0,67
16	0,136	0,017	45		-0,01
21	0,683	0,24	54		-0,01
22	1,092	0,24	55	0,267	0,067
23	0,528	0,255	61	0,136	0,013
26	-0,136	-0,017	62	-0,136	-0,013
31	0,528	0,175	66	0,337	0,05

Приравняем разность компонент тензора диэлектрической непроницаемости ($\eta_1 - \eta_2$) и компоненту тензора диэлектрической непроницаемости (η_6) к разности компонент добавки к исходному тензору диэлектрической непроницаемости ($\zeta_1 - \zeta_2$) и соответствующей компоненте (ζ_6):

$$\eta_1 - \eta_2 = \zeta_1 - \zeta_2, \quad \eta_6 = \zeta_6.$$

Далее переходим к напряжениям, для чего нужно знать пьезооптические коэффициенты $\pi_{\lambda\mu}$. Из [2] используем значения упругооптических коэффициентов $p_{\lambda\mu}$ (таблица). Пересчет их в $\pi_{\lambda\mu}$ производим следующим образом. Зная тензор упругой жесткости $c_{\lambda\mu}$ [3, 4], высчитываем обратный ему тензор упругой податливости $s_{\lambda\mu}$:

$$s_{\lambda\mu} = c_{\lambda\mu}^{-1}.$$

Теперь из тензоров $s_{\lambda\mu}$ и $p_{\lambda\mu}$ рассчитаем пьезооптические коэффициенты $\pi_{\lambda\mu}$ по формуле

$$\pi_{\lambda\mu} = p_{\lambda\mu} s_{\lambda\mu}.$$

Поскольку используемая специальная система координат совпадает с кристаллофизической, пересчет компонент тензора $\pi_{\lambda\mu}$ к специальной системе не требуется.

Изменение двумерного тензора диэлектрической непроницаемости ζ_i выразим через компоненты тензоров напряжений и пьезооптических коэффициентов:

$$\begin{aligned}\zeta_1 &= \sigma_1 \pi_{11} + \sigma_2 \pi_{12} + \sigma_6 \pi_{16}, \\ \zeta_2 &= \sigma_1 \pi_{21} + \sigma_2 \pi_{22} + \sigma_6 \pi_{26}, \\ \zeta_6 &= \sigma_1 \pi_{61} + \sigma_2 \pi_{62} + \sigma_6 \pi_{66}.\end{aligned}\quad (1)$$

Решая систему (1), рассчитываем разность компонент напряжений $(\sigma_1 - \sigma_2)$ и компоненту (σ_6) :

$$\begin{aligned}\sigma_1 - \sigma_2 &= \frac{2\zeta_6 \pi_{16} - (\zeta_1 - \zeta_2) \pi_{66}}{2\pi_{61} \pi_{16} - \pi_{66} (\pi_{11} - \pi_{21})}, \\ \sigma_6 &= \frac{\pi_{61} (\zeta_1 - \zeta_2) - \zeta_6 (\pi_{11} - \pi_{21})}{2\pi_{61} \pi_{16} - \pi_{66} (\pi_{11} - \pi_{21})}.\end{aligned}$$

Далее находим разность квазиглавных напряжений $(\sigma_{(1)} - \sigma_{(2)})$ в кристаллофизической системе координат и угол наклона траекторий квазиглавных напряжений ψ по формулам

$$\begin{aligned}\sigma_{(1)} - \sigma_{(2)} &= \sqrt{(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + 4\sigma_6^2} = \frac{\text{tg}^2 V (n_e^{-2} - n_o^{-2})}{\sqrt{\frac{(\pi_{11} - \pi_{12} + 2\pi_{16} \text{tg} 2\psi)^2 + (2\pi_{61} + \pi_{66} \text{tg} 2\psi)^2}{1 + \text{tg}^2 2\psi}}}, \\ \text{tg} 2\psi &= \frac{2\sigma_6}{\sigma_1 - \sigma_2} = \frac{\text{tg} 2\gamma (\pi_{11} - \pi_{12}) - 2\pi_{61}}{\pi_{66} - \pi_{16} \text{tg} 2\gamma}.\end{aligned}\quad (2)$$

Таким образом, экспериментально измеренные значения $2V$ и γ позволяют определить максимальные скалывающие напряжения $2\tau_{\text{max}} = (\sigma_{(1)} - \sigma_{(2)})$ и установить направление действия главных напряжений в данном сечении ψ . Обращаем внимание, что величина $2V$ зависит не только от разности квазиглавных напряжений $(\sigma_{(1)} - \sigma_{(2)})$ в плоскости наблюдения $X_1 - X_2$, но и от направления действия этих напряжений (угла ψ) (рис. 2):

$$\text{tg}^2 V = \frac{\sigma_{(1)} - \sigma_{(2)}}{n_e^{-2} - n_o^{-2}} \sqrt{\frac{(\pi_{11} - \pi_{12} + 2\pi_{16} \text{tg} 2\psi)^2 + (2\pi_{61} + \pi_{66} \text{tg} 2\psi)^2}{1 + \text{tg}^2 2\psi}} = \frac{\sigma_{(1)} - \sigma_{(2)}}{n_e^{-2} - n_o^{-2}} K^\#. \quad (3)$$

$K^\# \cdot 10^{-12}$, мм²/Н

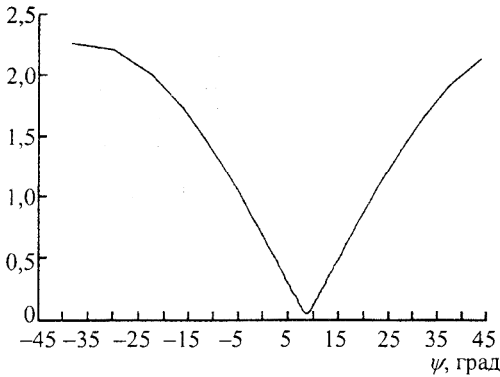


Рис. 2. Связь коэффициента $K^\#$ в уравнении (3) с углом ψ между $\sigma_{(1)}$ и X_1 .

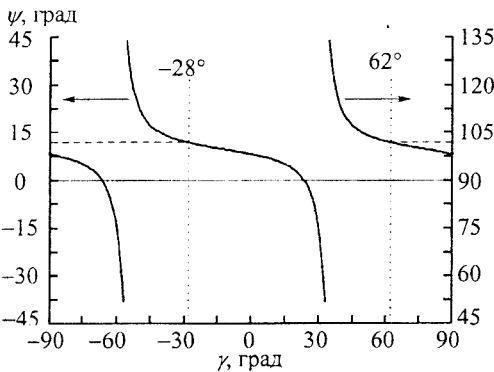


Рис. 3. Связь угла наклона плоскости оптических осей γ с направлением квазиглавных напряжений ψ .

Используя формулу (2), можно вывести связь углов наклона плоскости оптических осей γ от траекторий квази-главных напряжений ψ (рис. 3):

$$\operatorname{tg} 2\gamma = \frac{2\pi_{61} + \pi_{66} \operatorname{tg} 2\psi}{(\pi_{11} - \pi_{12}) + \pi_{16} \operatorname{tg} 2\psi}$$

Полученные нами картины (рис. 4) распределения квазиглавных напряжений и положения их траекторий имеют гораздо более сложный вид по сравнению с экспериментальными литературными данными по кристаллам полупроводников [5, 6] и результатами модельных расчетов для оптических кристаллов [4].

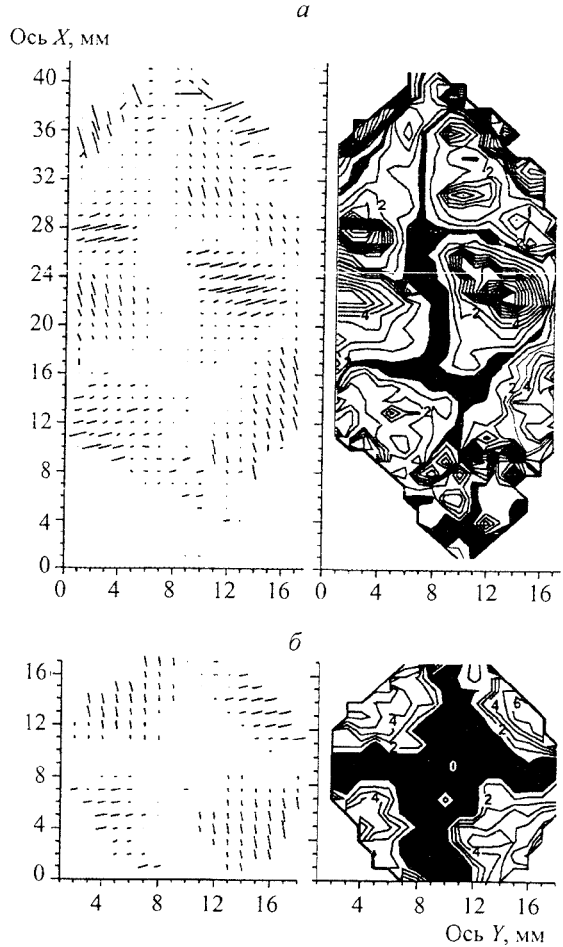


Рис. 4. Направление одного из квазиглавных напряжений и максимальные скалывающие напряжения.

Прежде всего бросается в глаза отсутствие плоскостей симметрии в положении как ПОО, так и траекторий главных нормальных напряжений для кристалла, выращенного вдоль оси Y . Причина этого очевидна и заключается в низкой симметрии тензоров коэффициентов упругой жесткости s_{ij} и пьезооптических коэффициентов π_{ij} для вида симметрии $4/m$ кристалла $PbMoO_4$. Если симметрию теплового поля считать цилиндрической, то принцип Кюри дает для продольного сечения кристалла по (001) только ось L_2 , перпендикулярную плоскости сечения. Для более реальной конической симметрии теплового поля продольное сечение кристалла по (001) вообще лишается элементов симметрии. В случае кристалла, выращенного вдоль оси Z , как в цилиндрическом, так и в коническом тепловом поле сохраняется ось L_4 . Обращаем внимание, что обычно принцип Кюри применяется к морфологии кристаллов. На рис. 4 видно, что неоднородность процессов переноса – неважно, тепла или вещества – влияет не только на внешнюю форму, но и на дефектность кристаллов.

Сложнее объяснить неоднократную смену положений ПОО (т. е. знака квазиглавных нормальных напряжений) по длине сечений. Можно предположить, что этот эффект связан с изменением по длине кристалла радиального теплового потока с его боковой поверхности.

Summary

Denisov A. V., Punin Ju. O., Shtukenberg A. G., Grunskii O. S. Investigation of optical anomalies and calculation of internal strains of lead molybdate crystals grown by the Czochralski technique.

The research is focused on the procedure of the study of optical anomalies and calculation of anomalous biaxiality of internal strains in lead molybdate crystals grown by the Czochralski technique. Applicability of the Curie principle to the strain distribution and crystal deficiency is demonstrated.

Литература

1. *Татарский В. Б.* Кристаллооптика и иммерсионный метод исследования минералов. М., 1965.
2. *Сиротин Ю. И., Шаскольская М. П.* Основы кристаллофизики. М., 1975.
3. *Coquin G. A., Pinnow D. A., Warner A. W.* Physical properties of lead molybdate relevant to acousto-optic device applications // *J. Appl. Phys.* 1971. Vol. 42(6).
4. *Miyazaki N.* Development of a thermal stress analysis system for anisotropic single crystal growth // *J. of Crystal Growth.* 2002. Vol. 236.
5. *Инденбом В. Л., Никитенко В. И.* Исследование напряжений в полупроводниках с помощью электронно-оптического преобразователя // *Напряжения и дислокации в полупроводниках* / Ред. М. В. Классен-Неклюдова. М., 1962.
6. *Чернов А. А., Гиваргизов Е. И., Багдасаров Х. С.* и др. Современная кристаллография: В 4 т. М., 1980. Т. 3.

Статья поступила в редакцию 10 июня 2005 г.