

正交晶系 YAP 晶体的热效应

沈 鸿 元

(中国科学院福建物质结构研究所)

1980年11月4日收到

提 要

本文从理论上分析了正交晶系 YAP 晶体激励过程引起的热效应。给出了晶体中温度分布、应力-应变分布、双折射效应、热透镜效应以及晶体在正交偏振器间等色线图等的解析关系式,得到的结果定性地解释了实验现象。

一、引 言

连续、高重复率和大功率固体激光器中,激励过程工作物质的热效应严重地破坏了谐振腔的光学均匀性,使得输出激光的相干性变差,限制了基模和偏振光的输出,这种效应严重时,甚至使多模输出下降。因此,热效应的研究是连续、高重复率和大功率固体激光器的一个重要课题。对于玻璃和立方晶系的 YAG 晶体,一些学者^[1-3]已从理论上查明了热效应的成因并得到了解析描述,满意地解释了实验结果。对于对称性低于立方晶系的其它晶体,还没有见到类似的研究工作。

本文从理论上研究了 b 轴 YAP 晶体的热效应,得到的解析解定性地解释了实验结果。这一工作为 YAP 激光器谐振腔的设计提供了依据,并对 b 轴 YAP 激光器的偏振特性作了解释。

二、 b 轴 YAP 棒的温度分布

假设激励过程激光棒是一根内部均匀发热的无限长圆柱,热量由流经棒侧壁的冷却液带走,忽略棒的端面效应以及冷却液的温度波动。热平衡时,正交晶系 YAP 晶体中温度分布由热导方程

$$\kappa_{11} \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \kappa_{33} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = -h \quad (2.1)$$

给出,式中 κ_{11} , κ_{33} 是热导率, h 是泵灯照射下 YAP 棒单位时间、单位体积内产生的热量 $h = \frac{\eta P_{in}}{\pi r_0^2 L}$, 式中 r_0 , L 分别是棒的半径和长度, P_{in} 是输入泵灯的电功率, η 是电(输入电功率)热(棒中产生的热量)转换效率。计算中取结晶 a , b , c 轴为座标轴。引入边界条件,当 $\begin{cases} x=0 \\ z=r_0 \end{cases}$ 时, $T = T_s$; 当 $\begin{cases} x=r_0 \\ z=0 \end{cases}$ 时, $T = T_s$, (2.1) 式的一个对称解为

$$T = T(x) - \frac{hx^2}{4\kappa_{33}} \quad \text{或} \quad T = T(z) - \frac{hz^2}{4\kappa_{11}}, \quad (2.2)$$

$$\text{式中} \quad T(x) = T_z - \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \left(\frac{x^2}{r_0^2} - 1 \right), \quad T(z) = T_x - \frac{hr_0^2}{4\kappa_{33}} \left(\frac{z^2}{r_0^2} - 1 \right) \quad (2.3)$$

它们分别是沿着坐标轴 x, z 的温度分布. 原点处

$$T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} = T_z + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{33}}. \quad (2.4)$$

将 (2.3) 代入 (2.2) 式, 得到

$$\frac{x^2}{c\kappa_{11}} + \frac{z^2}{c\kappa_{33}} = 1, \quad (2.5)$$

式中 $c = \frac{4}{h}(T_x - T) + \frac{r_0^2}{\kappa_{11}}$. 当 T 为常数时, 由 (2.5) 式看到 xz 平面上等温线为一椭圆.

由此得到如下结论: b 轴 YAP 棒中产生的热量在棒中造成一定的温度分布, 在垂直于棒轴的平面上其等温线是椭圆. 在坐标轴 x, z 上温度呈抛物线分布. 沿棒轴方向温度不变.

三、 b 轴 YAP 棒的热应力和热应变

弹性限度内, 晶体的应力-应变服从广义虎克定律. 在正交晶系中可表示为

$$\begin{aligned} \epsilon_1 &= \frac{1}{E_1}\sigma_x - \frac{\nu_{21}}{E_2}\sigma_y - \frac{\nu_{31}}{E_3}\sigma_z, & r_4 &= \frac{1}{G_4}\tau_{yz}, \\ \epsilon_2 &= -\frac{\nu_{12}}{E_1}\sigma_x + \frac{1}{E_2}\sigma_y - \frac{\nu_{32}}{E_3}\sigma_z, & r_5 &= \frac{1}{G_5}\tau_{zx}, \\ \epsilon_3 &= -\frac{\nu_{13}}{E_1}\sigma_x - \frac{\nu_{23}}{E_2}\sigma_y + \frac{1}{E_3}\sigma_z, & r_6 &= \frac{1}{G_6}\tau_{xy}, \end{aligned} \quad (3.1)$$

式中 ϵ_{1-3} 和 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ 分别是主轴应变和应力, r_{4-6} 和 $\tau_{yz}, \tau_{zx}, \tau_{xy}$ 分别是相应方向的剪切应变和应力, E_{1-3} 是杨氏模量, ν_{ij} 是泊松系数, G_{4-6} 是剪切模量, 在正交晶系中杨氏模量和泊松系数有下述关系: $E_1\nu_{21} = E_2\nu_{12}$, $E_2\nu_{32} = E_3\nu_{23}$, $E_3\nu_{13} = E_1\nu_{31}$.

存在热膨胀时, 若实际的应变为 ϵ_i , 则有

$$\begin{aligned} \epsilon_1 - \alpha_1 T &= \frac{1}{E_1}\sigma_x - \frac{\nu_{21}}{E_2}\sigma_y - \frac{\nu_{31}}{E_3}\sigma_z, \\ \epsilon_2 - \alpha_2 T &= -\frac{\nu_{12}}{E_1}\sigma_x + \frac{1}{E_2}\sigma_y - \frac{\nu_{32}}{E_3}\sigma_z, \\ \epsilon_3 - \alpha_3 T &= -\frac{\nu_{13}}{E_1}\sigma_x - \frac{\nu_{23}}{E_2}\sigma_y + \frac{1}{E_3}\sigma_z. \end{aligned} \quad (3.2)$$

为了求解应力和应变, 先固定棒的两端, 求解后再修正成自由情况, 两端固定后轴向位移 $v = 0$, 因而 $\epsilon_2 = 0$, 由 (3.2) 式的第 2 式可得 σ_y , 把它代入 (3.2) 式其它两式后, 得到 σ_x, σ_z , 结果为

$$\sigma_y = \frac{\nu_{12}E_2}{E_1}\sigma_x + \frac{\nu_{32}E_2}{E_3}\sigma_z - \alpha_2 E_2 T, \quad (3.3)$$

$$\begin{aligned}\sigma_x &= \frac{1}{AD - BC} (D\varepsilon_1 - B\varepsilon_3 + MT), \\ \sigma_z &= \frac{1}{AD - BC} (A\varepsilon_3 - C\varepsilon_1 + NT),\end{aligned}\quad (3.4)$$

式中

$$\begin{aligned}A &= \frac{1}{E_1} (1 - \nu_{12}\nu_{21}), & B &= \frac{-1}{E_3} (\nu_{31} + \nu_{21}\nu_{32}), \\ C &= \frac{-1}{E_1} (\nu_{13} + \nu_{12}\nu_{23}), & D &= \frac{1}{E_3} (1 - \nu_{23}\nu_{32}),\end{aligned}\quad (3.5)$$

$$M = B(\alpha_3 + \alpha_2\nu_{23}) - D(\alpha_1 + \alpha_2\nu_{21}), \quad N = C(\alpha_1 + \alpha_2\nu_{21}) - A(\alpha_3 + \alpha_2\nu_{23}). \quad (3.6)$$

为了求出应力、应变还必须利用平衡方程^[6,7], 考虑到棒轴方向是固定的, 沿棒轴方向长度不变, 而且外力为零, 所以平衡方程为

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sigma_x}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} &= 0,\end{aligned}\quad (3.7)$$

式中

$$\tau_{xz} = G_5 r_5 = G_5 \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right)^{[6,7]}, \quad (3.8)$$

u, v 和 w 分别是沿 x, y 和 z 方向的位移. 主轴应变和位移的关系为^[6,7]

$$\varepsilon_1 = \frac{\partial u}{\partial x}, \quad \varepsilon_2 = \frac{\partial v}{\partial y}, \quad \varepsilon_3 = \frac{\partial w}{\partial z}. \quad (3.9)$$

由 (3.4) 和 (3.7) 式, 并利用热位移弹性势 φ , 它定义为

$$u = \frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial \varphi}{\partial y}, \quad w = \frac{\partial \varphi}{\partial z}, \quad (3.10)$$

得到[见附录中(A.1)式]

$$\begin{aligned}D \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + R \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + MT - C_1 z^2 &= 0, \\ S \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + A \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + NT - C_2 x^2 &= 0.\end{aligned}\quad (3.11)$$

(3.11) 式是二阶偏微分方程组, 它的解在附录中 (A.2) 式给出

$$\begin{aligned}\varphi(xz) &= -\frac{AM - RN}{AD - RS} \left[\frac{T_x}{2} x^2 - \frac{hr_0^2}{8\kappa_{11}} \left(\frac{x^2}{6r_0^2} - 1 \right) x^2 \right] - \frac{RC_2}{12(AD - RS)} x^4 \\ &\quad - \frac{DN - SM}{AD - RS} \left[\frac{T_z}{2} z^2 - \frac{hr_0^2}{8\kappa_{33}} \left(\frac{z^2}{6r_0^2} - 1 \right) z^2 \right] \\ &\quad - \frac{SC_1}{12(AD - RS)} z^4 + \frac{AC_1 + (AM - RN) \frac{h}{4\kappa_{33}}}{2(AD - RS)} x^2 z^2.\end{aligned}\quad (3.12)$$

利用上式, 由 (3.10), (3.9), (3.8), (3.4) 和 (3.3) 式得到

$$u = -\frac{AM - RN}{AD - RS} \left[T_x x - \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \left(\frac{x^2}{3r_0^2} - 1 \right) x \right] - \frac{RC_2}{3(AD - RS)} x^3$$

$$+ \frac{AC_1 + (AM - RN)\frac{h}{4\kappa_{33}}}{AD - RS} xz^2, \quad (3.13)$$

$$w = -\frac{DN - SM}{AD - RS} \left[T_x z - \frac{hr_0^2}{4\kappa_{33}} \left(\frac{z^2}{r_0^2} - 1 \right) z \right] - \frac{SC_1}{3(AD - RS)} z^3$$

$$+ \frac{AC_1 + (AM - RN)\frac{h}{4\kappa_{33}}}{AD - RS} x^2 z, \quad (3.14)$$

$$\varepsilon_1 = -\frac{AM - RN}{AD - RS} \left[T_x - \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \left(\frac{x^2}{r_0^2} - 1 \right) \right] - \frac{RC_2}{AD - RS} x^2$$

$$+ \frac{AC_1 + (AM - RN)\frac{h}{4\kappa_{33}}}{AD - RS} z^2, \quad (3.15)$$

$$\varepsilon_3 = -\frac{DN - SM}{AD - RS} \left[T_x - \frac{hr_0^2}{4\kappa_{33}} \left(\frac{z^2}{r_0^2} - 1 \right) \right] - \frac{SC_1}{AD - RS} z^2$$

$$+ \frac{AC_1 + (AM - RN)\frac{h}{4\kappa_{33}}}{AD - RS} x^2, \quad (3.16)$$

$$\sigma_x = 2G_5 \frac{DN - SM}{AD - RS} T + 2G_5 \frac{SC_1 z^2 - DC_2 x^2}{AD - RS} + \frac{C_1 x^2}{AD - RS}, \quad (3.17)$$

$$\sigma_z = 2G_5 \frac{AM - RN}{AD - RS} T + 2G_5 \frac{RC_2 x^2 - AC_1 z^2}{AD - RS} + \frac{C_2 x^2}{AD - RS}, \quad (3.18)$$

$$\sigma_y = \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \right) H_1 + \left(H_2 C_1 - \frac{hH_1}{4\kappa_{33}} \right) z^2 + \left(H_3 C_2 - \frac{hH_1}{4\kappa_{11}} \right) x^2, \quad (3.19)$$

式中

$$H_1 = \frac{2G_5}{AD - RS} \left[\frac{\nu_{12}E_2}{E_1} (DN - SM) + \frac{\nu_{32}E_2}{E_3} (AM - RN) - \alpha_2 E_2 \right],$$

$$H_2 = \frac{2G_5}{AD - RS} \left\{ \frac{\nu_{12}E_2}{E_1} \left[S + \frac{AD - RS}{2G_5(AD - BC)} \right] - \frac{\nu_{32}E_2}{E_3} A \right\},$$

$$H_3 = \frac{2G_5}{AD - RS} \left\{ \frac{\nu_{32}E_2}{E_3} \left[R + \frac{AD - RS}{2G_5(AD - BC)} \right] - \frac{\nu_{12}E_2}{E_1} D \right\}, \quad (3.20)$$

$$\tau_{xz} = 4G_5 \frac{AC_1 + (AM - RN)\frac{h}{4\kappa_{33}}}{AD - RS} xz. \quad (3.21)$$

另外 $\nu = 0$, $\varepsilon_2 = 0$,

$$\tau_{yz} = G_4 r_4 = G_4 \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial y} \right) = 0, \quad \tau_{xy} = G_6 r_6 = G_6 \left(\frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial x} \right) = 0.$$

这样得到了两端固定情况下位移、应变、应力的所有值, 上述结果的正确性利用平衡方程和相容方程^[6,7]进行了验证。

现在必须修正成自由端, 这只要在端面上加一个均匀分布的力 $\pi r_0^2 \sigma_{\text{corr}}$, 使得端面上受的力为零, 由此得 σ_{corr} , 并将它加到 σ_y 上, 得到修正成自由情况下沿 y 方向的应力 σ_{y1} ,

$$\sigma_{yf} = \left(H_2 C_1 - \frac{h H_1}{4 \kappa_{33}} \right) \left(z^2 - \frac{3 r_0^2}{4} \right) + \left(H_3 C_2 - \frac{h H_1}{4 \kappa_{11}} \right) \left(x^2 - \frac{r_0^2}{4} \right). \quad (3.22)$$

修正成自由端后, 对 σ_x 和 σ_z 没有影响, 但对 u , w 和 ε_1 , ε_3 有一定影响^[6,7], 这从 (3.2) 式可以看出, 考虑这种影响后,

$$\begin{aligned} u_f = & -\frac{AM - RN}{AD - RS} \left[T_x x - \frac{h r_0^2}{4 \kappa_{11}} \left(\frac{x^2}{3 r_0^2} - 1 \right) x \right] - \frac{RC_2}{3(AD - RS)} x^3 \\ & + \frac{AC_1 + (AM - RN) \frac{h}{4 \kappa_{33}}}{AD - RS} x z^2 + \frac{\nu_{21}}{E_2} x \left[H_1 \left(T_x + \frac{h r_0^2}{4 \kappa_{11}} \right) \right. \\ & \left. + \frac{r_0^2}{4} \left(H_3 C_2 - \frac{h H_1}{4 \kappa_{11}} \right) + \frac{3 r_0^2}{4} \left(H_2 C_1 - \frac{h H_1}{4 \kappa_{33}} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.23)$$

$$\begin{aligned} w_f = & -\frac{DN - SM}{AD - RS} \left[T_z z - \frac{h r_0^2}{4 \kappa_{33}} \left(\frac{z^2}{3 r_0^2} - 1 \right) z \right] - \frac{SC_1}{3(AD - RS)} z^3 \\ & + \frac{AC_1 + (AM - RN) \frac{h}{4 \kappa_{33}}}{AD - RS} x^2 z + \frac{\nu_{23}}{E_3} z \left[H_1 \left(T_x + \frac{h r_0^2}{4 \kappa_{11}} \right) \right. \\ & \left. + \frac{r_0^2}{4} \left(H_3 C_2 - \frac{h H_1}{4 \kappa_{11}} \right) + \frac{3 r_0^2}{4} \left(H_2 C_1 - \frac{h H_1}{4 \kappa_{33}} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.24)$$

修正成自由端后, $v \approx 0$, 由 (3.2) 式,

$$\varepsilon_{2f} = \frac{-1}{E_2} \left[H_1 \left(T_x + \frac{h r_0^2}{4 \kappa_{11}} \right) + \frac{r_0^2}{4} \left(H_3 C_2 - \frac{h H_1}{4 \kappa_{11}} \right) + \frac{3 r_0^2}{4} \left(H_2 C_1 - \frac{h H_1}{4 \kappa_{33}} \right) \right], \quad (3.25)$$

$$\nu_f = \frac{-1}{E_2} \left[H_1 \left(T_x + \frac{h r_0^2}{4 \kappa_{11}} \right) + \frac{r_0^2}{4} \left(H_3 C_2 - \frac{h H_1}{4 \kappa_{11}} \right) + \frac{3 r_0^2}{4} \left(H_2 C_1 - \frac{h H_1}{4 \kappa_{33}} \right) \right] y. \quad (3.26)$$

修正成自由端后 r_{yzf} , r_{xyf} , τ_{yzf} 和 τ_{xyf} 仍等于零, 由 (3.23) 和 (3.24) 式可见 τ_{zxf} 仍等于

$$4G_5 \frac{AC_1 + (AM - RN) \frac{h}{4 \kappa_{33}}}{AD - RS} xz. \text{ 由 (3.23) 式和 (3.24) 式立即得到 } \varepsilon_{1f} \text{ 和 } \varepsilon_{2f}. \text{ 这样得到}$$

了自由情况下, 棒中位移、应变和应力的分布. 从这些结果得到以下结论:

1. $x(z)$ 方向的应力、应变不仅是 $x(z)$ 的函数, 而且与坐标 $z(x)$ 有关, 在坐标轴上应力、应变呈抛物线分布.

2. y 方向的应变与 x , z 无关, 这与 YAG 的结果相同^[3], 即热应变不会直接使棒产生棱镜状形变, 因而对热聚焦没有贡献.

光弹性效应仅与弹性形变有关, 而与热膨胀无关, 为了分析下面的光弹性效应, 必须求出弹性应变, 利用 $\varepsilon_i = \varepsilon_i - \alpha_i T$ (式中 $i = 1, 2, 3$; α_1 , α_2 和 α_3 分别是沿 x , y 和 z 方向的热膨胀系数) 和已得到的 ε_i , 立即得到 ε_i , 通过 $\varepsilon_1 = \frac{\partial \bar{u}}{\partial x}$, $\varepsilon_2 = \frac{\partial \bar{v}}{\partial y}$ 和 $\varepsilon_3 = \frac{\partial \bar{w}}{\partial z}$, 得到主形变, 再由 $\bar{\tau}_4 = \frac{\partial \bar{v}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial y}$, $\bar{\tau}_5 = \frac{\partial \bar{u}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial x}$, $\bar{\tau}_6 = \frac{\partial \bar{u}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial x}$, 得到剪切应变, 结果为

$$\varepsilon_1 = A_1 x^2 + B_1 z^2 + C'_1, \quad \bar{\tau}_4 = A_4 yz,$$

$$\begin{aligned} \epsilon_2 &= A_2 x^2 + B_2 z^2 + C'_2, & \bar{r}_5 &= A_5 z x, \\ \epsilon_3 &= A_3 x^2 + B_3 z^2 + C'_3, & \bar{r}_6 &= A_6 x y. \end{aligned} \quad (3.27)$$

$$\begin{aligned} \bar{u} &= A_1 x^3 + B_1 x z^2 + C'_1 x + C', \\ \bar{v} &= A_2 x^2 y + B_2 y z^2 + C'_2 y + C'', \\ \bar{w} &= A_3 x^2 z + B_3 z^3 + C'_3 z + C'''. \end{aligned} \quad (3.28)$$

这里

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{h}{4\kappa_{11}} \left(\frac{AM - RN}{AD - RS} + \alpha_1 \right) - \frac{RC_2}{AD - RS}, & B_1 &= \frac{\alpha_1 h}{4\kappa_{33}} + \frac{AC_1 + (AM - RN)\frac{h}{4\kappa_{33}}}{AD - RS}, \\ C'_1 &= \frac{\nu_{21}}{E_2} \left[H_1 \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \right) + \frac{r_0^2}{4} \left(H_3 C_2 - \frac{hH_1}{4\kappa_{11}} \right) + \frac{3r_0^2}{4} \left(H_2 C_1 - \frac{hH_1}{4\kappa_{33}} \right) \right] \\ &\quad - \frac{AM - RN}{AD - RS} \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \right) - \alpha_1 \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \right), \\ A_2 &= \frac{\alpha_2 h}{4\kappa_{11}}, & B_2 &= \frac{\alpha_2 h}{4\kappa_{33}}, & C'_2 &= -\alpha_2 \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \right) - \frac{1}{E_2} \left[H_1 \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \right) \right. \\ &\quad \left. + \frac{r_0^2}{4} \left(H_3 C_2 - \frac{hH_1}{4\kappa_{11}} \right) + \frac{3r_0^2}{4} \left(H_2 C_1 - \frac{hH_1}{4\kappa_{33}} \right) \right], \\ A_3 &= \frac{\alpha_3 h}{4\kappa_{11}} + \frac{AC_1 + (AM - RN)\frac{h}{4\kappa_{33}}}{AD - RS}, & B_3 &= \frac{h}{4\kappa_{33}} \left(\frac{DN - SM}{AD - RS} + \alpha_3 \right) - \frac{SC_1}{AD - RS}, \\ C'_3 &= \frac{\nu_{23}}{E_3} \left[H_1 \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \right) + \frac{r_0^2}{4} \left(H_3 C_2 - \frac{hH_1}{4\kappa_{11}} \right) + \frac{3r_0^2}{4} \left(H_2 C_1 - \frac{hH_1}{4\kappa_{33}} \right) \right] \\ &\quad - \frac{DN - SM}{AD - RS} \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{33}} \right) - \alpha_3 \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \right), \\ A_4 &= \frac{\alpha_2 h}{2\kappa_{33}}, & A_5 &= 4 \frac{AC_1 + (AM - RN)\frac{h}{4\kappa_{33}}}{AD - RS} + \frac{h}{2} \left(\frac{\alpha_1}{\kappa_{33}} + \frac{\alpha_3}{\kappa_{11}} \right), & A_6 &= \frac{\alpha_2 h}{2\kappa_{11}}. \end{aligned} \quad (3.29)$$

由于在坐标原点 $\bar{u}, \bar{v}, \bar{w}$ 均为零, 所以常数 $C' = C'' = C''' = 0$.

四、 b 轴 YAP 晶体的光弹性效应

YAP 晶体属扭曲的钙钛矿结构, 空间群是 $D_{2h}^6-P_{6mm}$, 光学上是负双轴晶. 其折射率可用示性面表示, 它是一椭球面 (图 1), 可表示为

$$B_{ij}x_i x_j = 1, \quad (4.1)$$

式中 B_{ij} 是光频介电常数.

激励过程中 YAP 产生热效应, 通过光弹性效应, 使折射率椭球的大小、形状和取向发生变化. 热应变引起光频介电常数的变化为

$$\Delta B_m = p_{mn} \epsilon_n \quad m, n = 1, 2, \dots, 6, \quad (4.2)$$

式中已利用了 Nye 规则^[8], p_{mn} 是弹性光学系数, 对于正交晶系晶体^[8]为

$$p_{mn} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & 0 & 0 \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & 0 & 0 & 0 \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_{66} \end{pmatrix}. \quad (4.3)$$

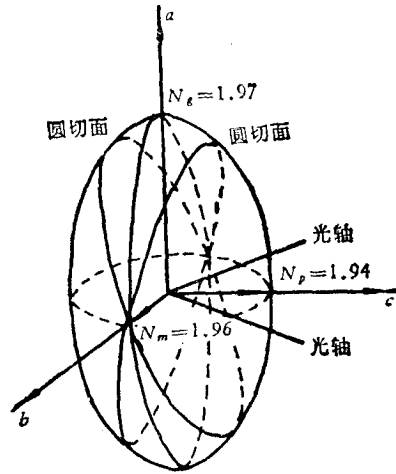


图1 正交晶系 YAP 晶体的折射率椭球

由(4.2), (4.3)式和(3.27)式得到

$$\begin{pmatrix} \Delta B_1 \\ \Delta B_2 \\ \Delta B_3 \\ \Delta B_4 \\ \Delta B_5 \\ \Delta B_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_1 - B_1^0 \\ B_2 - B_2^0 \\ B_3 - B_3^0 \\ B_4 \\ B_5 \\ B_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} p_{11} & p_{12} & p_{13} & 0 & 0 & 0 \\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & 0 & 0 & 0 \\ p_{31} & p_{32} & p_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & p_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e_1 \\ e_2 \\ e_3 \\ \bar{r}_4 \\ \bar{r}_5 \\ \bar{r}_6 \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} p_{11}e_1 + p_{12}e_2 + p_{13}e_3 \\ p_{21}e_1 + p_{22}e_2 + p_{23}e_3 \\ p_{31}e_1 + p_{32}e_2 + p_{33}e_3 \\ p_{44}\bar{r}_4 \\ p_{55}\bar{r}_5 \\ p_{66}\bar{r}_6 \end{pmatrix}. \quad (4.4)$$

由此得

$$\begin{aligned} \Delta B_1 &= (p_{11}A_1 + p_{12}A_2 + p_{13}A_3)x^2 + (p_{11}B_1 + p_{12}B_2 + p_{13}B_3)z^2 \\ &\quad + (p_{11}C'_1 + p_{12}C'_2 + p_{13}C'_3), \\ \Delta B_2 &= (p_{21}A_1 + p_{22}A_2 + p_{23}A_3)x^2 + (p_{21}B_1 + p_{22}B_2 + p_{23}B_3)z^2 \\ &\quad + (p_{21}C'_1 + p_{22}C'_2 + p_{23}C'_3), \\ \Delta B_3 &= (p_{31}A_1 + p_{32}A_2 + p_{33}A_3)x^2 + (p_{31}B_1 + p_{32}B_2 + p_{33}B_3)z^2 \end{aligned}$$

$$+ (p_{31}C'_1 + p_{32}C'_2 + p_{33}C'_3).$$

$$\Delta B_4 = B_4 = p_{44}A_4yz,$$

$$\Delta B_5 = B_5 = p_{55}A_5zx,$$

$$\Delta B_6 = B_6 = p_{66}A_6xy. \quad (4.5)$$

此时,垂直于 b 轴的 x_1x_3 (即 x, z) 切面上折射率满足的方程为

$$B'_1x_1^2 + B'_3x_3^2 + 2B_5x_1x_3 = 1, \quad (4.6)$$

式中 $B'_i = B_i^0 + \Delta B_i$, $B_i^0 = \frac{1}{n_i^2}$, $n_1 = 1.97$, $n_3 = 1.94$ ($i = 1, 3$). 热应变使 x_1, x_3 平面

上的折射率椭圆的主轴(自由状态下沿 a, c 轴)旋转了一个 ϕ 角,在以新折射率椭圆主轴为座标 (x'_1, x'_3) 的系统中,折射率椭圆方程为

$$B_1^*x_1'^2 + B_3^*x_3'^2 = 1. \quad (4.7)$$

由 Mohr 圆作图法^[8],可得

$$\begin{aligned} B_1^* &= B_1^0 + \Delta B_1 + \frac{\Delta B_5^2}{B_1^0 + \Delta B_1 - B_3^0 - \Delta B_3} \doteq B_1^0 + \Delta B_1, \\ B_3^* &= B_3^0 + \Delta B_3 - \frac{\Delta B_5^2}{B_1^0 + \Delta B_1 - B_3^0 - \Delta B_3} \doteq B_3^0 + \Delta B_3 \end{aligned} \quad (4.8)$$

及

$$\phi \doteq \frac{\Delta B_5}{B_1^0 - B_3^0}. \quad (4.9)$$

对 b 轴 YAP 棒 $B_1^0 - B_3^0 \doteq 10^{-2}$, ΔB_5 一般小于 10^{-4} , 所以热应变诱导折射率椭圆主轴的旋转角小于 0.01 弧度,也即热应变主要引起垂直棒轴截面上折射率椭圆的大小和形状变化,而折射率椭圆主轴的方向几乎不变,在新坐标系内(几乎就是原来的 x, z 方向)折射率为

$$\begin{aligned} n_1^* &= n_1 - \frac{n_1^3}{2} \Delta B_1 = n_1 - \frac{n_1^3}{2} [(p_{11}A_1 + p_{12}A_2 + p_{13}A_3)x^2 + (p_{11}B_1 \\ &\quad + p_{12}B_2 + p_{13}B_3)z^2 + (p_{11}C'_1 + p_{12}C'_2 + p_{13}C'_3)], \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\begin{aligned} n_3^* &= n_3 - \frac{n_3^3}{2} \Delta B_3 = n_3 - \frac{n_3^3}{2} [(p_{31}A_1 + p_{32}A_2 + p_{33}A_3)x^2 + (p_{31}B_1 \\ &\quad + p_{32}B_2 + p_{33}B_3)z^2 + (p_{31}C'_1 + p_{32}C'_2 + p_{33}C'_3)]. \end{aligned} \quad (4.11)$$

由此立即得到双折射 $(n_1^* - n_3^*)$. 光通过长 L 双折射率为 $n_1^* - n_3^*$ 的一段晶体后产生的相位差 Γ 为

$$\begin{aligned} \Gamma &\doteq \frac{2\pi L}{\lambda} (n_1 - n_3) + \frac{\pi L}{\lambda} n_3^3 \{ [(p_{31} - p_{11})A_1 + (p_{32} - p_{12})A_2 + (p_{33} - p_{13})A_3]x^2 \\ &\quad + [(p_{31} - p_{11})B_1 + (p_{32} - p_{12})B_2 + (p_{33} - p_{13})B_3]z^2 \\ &\quad + [(p_{31} - p_{11})C'_1 + (p_{32} - p_{12})C'_2 + (p_{33} - p_{13})C'_3] \}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

综上所述得到如下结论:

1. 热应变仅引起折射率椭圆大小和形状变化,折射率椭圆主轴的方向几乎不变.
2. 与自由状态不同,遭受热应变后,沿着 x 和 z 方向的折射率是 x^2 和 z^2 的函数.
3. 沿着坐标轴的折射率呈抛物线分布,即

$$n_{x=0}(x) = n_1^* = \left[n_1 - \frac{n_1^3}{2} (p_{11}C'_1 + p_{12}C'_2 + p_{13}C'_3) \right] \times \left[1 - \frac{\frac{n_1^3}{2} (p_{11}A_1 + p_{12}A_2 + p_{13}A_3)x^2}{n_1 - \frac{n_1^3}{2} (p_{11}C'_1 + p_{12}C'_2 + p_{13}C'_3)} \right], \quad (4.13)$$

$$n_{x=0}(z) = n_3^* = \left[n_3 - \frac{n_3^3}{2} (p_{31}C'_1 + p_{32}C'_2 + p_{33}C'_3) \right] \times \left[1 - \frac{\frac{n_3^3}{2} (p_{31}B_1 + p_{32}B_2 + p_{33}B_3)z^2}{n_3 - \frac{n_3^3}{2} (p_{31}C'_1 + p_{32}C'_2 + p_{33}C'_3)} \right]. \quad (4.14)$$

所以沿 a 轴, c 轴可以分别将棒视为一类似透镜介质, 整根棒视为两个二维的类似透镜介质。

五、正交偏振器间 b 轴 YAP 棒的等色线图

若垂直于棒轴截面上折射率椭圆的主轴与正交偏振器偏振方向间交角为 θ , 利用 Jones 矩阵法^[9] 可求解强度为 $I_0 = E_0^2$ 的 He-Ne 激光通过这一光学系统后的光强分布, 沿 xz 方向输出的幅度分量为

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-i\Gamma} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{E_0}{\sqrt{2}} \\ \frac{E_0}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \\ = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \sin 2\theta (1 - e^{-i\Gamma}) \frac{E_0}{\sqrt{2}} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.1)$$

输出光强是 Ket 与 bra 的乘积

$$I_{\text{out}} = (E_x^* E_z^*) \begin{pmatrix} E_x \\ E_z \end{pmatrix} = \frac{I_0}{2} \sin^2 2\theta \sin^2 \frac{\Gamma}{2}. \quad (5.2)$$

下面讨论三种情况:

1. 处在自由状态的晶体, 晶轴与偏振器方向重合(即 $\theta = 0$) 时, 由 (5.2) 式得 $I_{\text{out}} = 0$, 即消光。

2. 晶体晶轴与偏振方向重合时, 遭受热应变后, 折射率椭圆主轴与偏振器偏振方向夹角 $\theta = \phi$, 输出光强为 $I_{\text{out}} = \frac{I_0}{2} \sin^2 2\phi \sin^2 \frac{\Gamma}{2}$. 因为 $\phi < 0.01$ 弧度, 若 $\Gamma = \pi$, $\frac{I}{I_0} < 1.999 \times 10^{-4}$. 若所用 He-Ne 激光器输出为 1 毫瓦, 从检偏器输出的光强 $< 10^{-7}$ 瓦。

3. 晶体晶轴与偏振器偏振方向成 45 度时, 遭受热应变后, 棒折射率椭圆主轴与偏振

器夹角 $\theta = 45 \pm \phi$, 输出光强 $I_{\text{out}} = \frac{I_0}{2} \sin^2 \frac{\Gamma}{2}$. 当 $\frac{\Gamma}{2} = n \frac{\pi}{2}$ 时, I_{out} 最大, $\frac{\Gamma}{2} = n\pi$ 时, $I_{\text{out}} = 0$. 从 (4.12) 式可以知道, 遭受热应变的 b 轴 YAP 棒相位差由自然双折射和热应变双折射两部分组成, 前者与座标无关, 后者是座标的函数, 当由此产生的光程差交替地从半波长整数倍变到波长的整数倍时, 透过的光强将交替地由亮变暗. 在垂直于棒轴的截面上, 光程差相同的位置透过光强相等, 由此得等色线图. 当 Γ 是常数时, 由 (4.12) 式得

$$\frac{x^2}{\xi^2} + \frac{z^2}{\eta^2} = 1, \quad (5.3)$$

式中

$$\xi^2 = \frac{\frac{\lambda \Gamma}{n_3^3 \pi L} + \frac{2}{n_3^3} (n_1 - n_3) - [(p_{31} - p_{11})C'_1 + (p_{32} - p_{12})C'_2 + (p_{33} - p_{13})C'_3]}{(p_{31} - p_{11})A_1 + (p_{32} - p_{12})A_2 + (p_{33} - p_{13})A_3}, \quad (5.4)$$

$$\eta^2 = \frac{\frac{\lambda \Gamma}{n_3^3 \pi L} + \frac{2}{n_3^3} (n_1 - n_3) - [(p_{31} - p_{11})C'_1 + (p_{32} - p_{12})C'_2 + (p_{33} - p_{13})C'_3]}{(p_{31} - p_{11})B_1 + (p_{32} - p_{12})B_2 + (p_{33} - p_{13})B_3}. \quad (5.5)$$

由此得到遭受热应变的 b 轴 YAP 棒在正交偏振器间的等色线图是一簇亮暗交替的椭圆, 当 $\theta = 45$ 度时, 亮暗对比度最大, 椭圆的长短轴接近 a, c 轴.

六、 b 轴 YAP 棒的热透镜效应

第四节中求出了热应变引起的折射率变化, 但在计算温度引起折射率变化时, 还必须考虑折射率温度系数的影响. 此时沿 x, z 方向的折射率为

$$n(x) = n_1 + \Delta n_T(x) + \Delta n_e(x), \quad n(z) = n_3 + \Delta n_T(z) + \Delta n_e(z), \quad (6.1)$$

式中

$$\Delta n_T(x) = \frac{\partial n_1}{\partial T} \Delta T, \quad \Delta n_T(z) = \frac{\partial n_3}{\partial T} \Delta T, \quad (6.2)$$

而 ΔT 是棒截面中心与边缘的温差, 由 (2.2)–(2.4) 式得到

$$\Delta T = -\frac{\eta p_{\text{in}}}{4\pi r_0^2 L} \left(\frac{x^2}{\kappa_{11}} + \frac{z^2}{\kappa_{33}} \right). \quad (6.3)$$

由 (6.2), (6.3) 式得到

$$\Delta n_T(x) = -m_1 \left(\frac{x^2}{\kappa_{11}} + \frac{z^2}{\kappa_{33}} \right), \quad \Delta n_T(z) = -m_3 \left(\frac{x^2}{\kappa_{11}} + \frac{z^2}{\kappa_{33}} \right), \quad (6.4)$$

式中

$$m_1 = \frac{\eta p_{\text{in}}}{4\pi r_0^2 L} \times \frac{\partial n_1}{\partial T}, \quad m_3 = \frac{\eta p_{\text{in}}}{4\pi r_0^2 L} \times \frac{\partial n_3}{\partial T}. \quad (6.5)$$

若忽略热应变引起折射率椭圆主轴的旋转角, 则可由 (4.10) 和 (4.11) 式得到

$$\Delta n_e(x) = -\theta_1 x^2 - R_1 z^2 - S_1, \quad \Delta n_e(z) = -\theta_3 x^2 - R_3 z^2 - S_3, \quad (6.6)$$

式中

$$\begin{aligned}\theta_1 &= \frac{n_1^3}{2} (p_{11}A_1 + p_{12}A_2 + p_{13}A_3), \quad R_1 = \frac{n_1^3}{2} (p_{11}B_1 + p_{12}B_2 + p_{13}B_3), \\ S_1 &= \frac{n_1^3}{2} (p_{11}C'_1 + p_{12}C'_2 + p_{13}C'_3), \quad \theta_3 = \frac{n_3^3}{2} (p_{31}A_1 + p_{32}A_2 + p_{33}A_3), \\ R_3 &= \frac{n_3^3}{2} (p_{31}B_1 + p_{32}B_2 + p_{33}B_3), \quad S_3 = \frac{n_3^3}{2} (p_{31}C'_1 + p_{32}C'_2 + p_{33}C'_3).\end{aligned}\quad (6.7)$$

将(6.4)–(6.7)式代入(6.1)式,得到

$$n(x) = (n_1 - S_1) \left[1 - \frac{\frac{m_1}{\kappa_{11}} + \theta_1}{n_1 - S_1} x^2 - \frac{\frac{m_1}{\kappa_{33}} + R_1}{n_1 - S_1} z^2 \right], \quad (6.8)$$

$$n(z) = (n_3 - S_3) \left[1 - \frac{\frac{m_3}{\kappa_{11}} + \theta_3}{n_3 - S_3} x^2 - \frac{\frac{m_3}{\kappa_{33}} + R_3}{n_3 - S_3} z^2 \right]. \quad (6.9)$$

对于沿 a 轴 ($z = 0$) 和 c 轴 ($x = 0$) 的两种特殊情况,分别得到

$$n_{z=0}(x) = (n_1 - S_1) \left[1 - \frac{\frac{m_1}{\kappa_{11}} + \theta_1}{n_1 - S_1} x^2 \right], \quad n_{x=0}(x) = (n_1 - S_1) \left[1 - \frac{\frac{m_1}{\kappa_{33}} + R_1}{n_1 - S_1} z^2 \right], \quad (6.10)$$

$$n_{z=0}(z) = (n_3 - S_3) \left[1 - \frac{\frac{m_3}{\kappa_{11}} + \theta_3}{n_3 - S_3} x^2 \right], \quad n_{x=0}(z) = (n_3 - S_3) \left[1 - \frac{\frac{m_3}{\kappa_{33}} + R_3}{n_3 - S_3} z^2 \right]. \quad (6.11)$$

方程(6.10), (6.11)中四个折射率与类似透镜介质的折射率分布 $n(r) = n_0 \left(1 - \frac{2r^2}{b^2} \right)$

相似,文献[10, 3]已给出长为 L 的一段类似透镜介质可视为一个厚透镜,其焦距 f 和端面到主平面的距离 H 分别为

$$f = b \left(2n_0 \sin \frac{2L}{b} \right)^{-1} \doteq \frac{b^2}{4n_0L}, \quad H = \frac{b}{2n_0} \operatorname{tg} \frac{L}{b} \doteq \frac{L}{2n_0} \quad (\text{当 } L \ll b \text{ 时}). \quad (6.12)$$

将(6.10), (6.11)式与类似透镜介质比较,由(6.12)式得到四个厚透镜,其 H 和 f 分别为

$$\begin{aligned}H_{z=0}(x) &\doteq \frac{L}{2(n_1 - S_1)} \doteq \frac{L}{2n_1}, \quad H_{x=0}(x) \doteq \frac{L}{2(n_1 - S_1)} \doteq \frac{L}{2n_1}, \\ H_{z=0}(z) &\doteq \frac{L}{2(n_3 - S_3)} \doteq \frac{L}{2n_3}, \quad H_{x=0}(z) \doteq \frac{L}{2(n_3 - S_3)} \doteq \frac{L}{2n_3},\end{aligned}\quad (6.13)$$

$$\begin{aligned}f_{z=0}(x) &= 1 / \left\{ \frac{\eta p_{in}}{2\pi r_0^2 \kappa_{11}} \left\{ \frac{\partial n_1}{\partial T} + \frac{n_1^3}{2} \left[p_{11} \left(\frac{AM - RN}{AD - RS} + \alpha_1 \right) + p_{12}\alpha_2 \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + p_{13} \left(\frac{DN - SM}{AD - RS} + \alpha_3 \right) \right] \right\} + \frac{n_1^3 L C_2}{AD - RS} (Dp_{13} - Rp_{11}) \right\},\end{aligned}\quad (6.14)$$

$$\begin{aligned}f_{x=0}(x) &= 1 / \left\{ \frac{\eta p_{in}}{2\pi r_0^2 \kappa_{33}} \left\{ \frac{\partial n_1}{\partial T} + \frac{n_1^3}{2} \left[p_{11} \left(\frac{AM - RN}{AD - RS} + \alpha_1 \right) + p_{12}\alpha_2 \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + p_{13} \left(\frac{DN - SM}{AD - RS} + \alpha_3 \right) \right] \right\} + \frac{n_1^3 L C_1}{AD - RS} (Ap_{11} - Sp_{13}) \right\},\end{aligned}\quad (6.15)$$

$$f_{z=0}(z) = 1 / \left\{ \frac{\eta p_{in}}{2\pi r_0^2 \kappa_{11}} \left\{ \frac{\partial n_3}{\partial T} + \frac{n_3^3}{2} \left[p_{31} \left(\frac{AM - RN}{AD - RS} + \alpha_1 \right) + p_{32}\alpha_2 \right. \right. \right.$$

$$+ p_{33} \left(\frac{DN - SM}{AD - RS} + \alpha_3 \right) \left. \right\} + \frac{n_3^3 L C_2}{AD - RS} (Dp_{33} - Rp_{31}) \left. \right\}, \quad (6.16)$$

$$f_{x=0}(z) = 1 / \left\{ \frac{\eta p_{in}}{2\pi r_0^2 \kappa_{33}} \left\{ \frac{\partial n_3}{\partial T} + \frac{n_3^3}{2} \left[p_{31} \left(\frac{AM - RN}{AD - RS} + \alpha_1 \right) + p_{32} \alpha_2 \right. \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + p_{33} \left(\frac{DN - SM}{AD - RS} + \alpha_3 \right) \right] \right\} + \frac{n_3^3 L C_1}{AD - RS} (Ap_{31} - Sp_{33}) \right\}, \quad (6.17)$$

(6.14)–(6.17) 式中已利用了 (6.5)–(6.7), (3.29), (A.11) 式和 $h = \frac{\eta p_{in}}{\pi r_0^2 L}$.

从上面的计算可见, 可以把遭受热效应的 YAP 棒看作两个二维的厚透镜, 它们分别对沿 x 方向和 z 方向的偏振光起作用. 对于每个厚透镜在 x 轴和 z 轴上聚焦作用是不同的, 可以用类似透镜介质来处理. 这样, 我们可以把含有类似透镜介质谐振腔的计算^[11]用于 YAP 激光器.

七、实验和结果

测定 b 轴 Nd:YAP 棒中热应变诱导折射率椭圆主轴的转角, 正交偏振器间 YAP 棒的等色线图以及热透镜焦距, 以此验证上述理论计算的正确性.

1. b 轴 Nd:YAP 棒中热应变诱导折射率椭圆主轴转角的测定

热应变诱导折射率椭圆主轴转角可以用直接法测定, 也可以通过输出激光退偏度的测定来估计. 文献 [12] 给出了这两种方法的装置和结果. 用直接法在氦灯上加上 4 千瓦 (单椭圆聚光腔), 没有观察到椭圆主轴旋转. 另外, 在双椭圆聚光腔中测定输出激光的退偏度, 结果在不同输出功率时退偏度趋于零. 实验中输入 5945 瓦时, 得到 23.75 瓦线偏振的激光输出. 由于退偏度 $\frac{I_x}{I_z} = \phi^2(e^{i\tau} - 1)^2$, 随着输入功率变化 $(e^{i\tau} - 1)^2$ 在 0 至 4 间变化, 但 $\frac{I_x}{I_z} = 0$, 这只有一个可能, 即 ϕ^2 的确非常小, 与 (4.9) 式的结果一致.

2. 等色线图的测量

实验装置见图 2. 棒置于正交偏振器间, 将棒绕光轴转动, 使纸屏上 He-Ne 激光光斑消失 (此时棒 a, c 轴与偏振器方向重合). 加上光泵后, 屏上仍未见 He-Ne 光斑. 此时绕光轴转动棒, 则可在纸屏上看到一簇亮暗相间的椭圆 [图 3 (见图版 I)]. 当棒 a, c 轴与偏振方向成 45 度时, 亮暗对比度最大. 随着功率增加, 椭圆数目增加. 图中椭圆少许畸变是晶体光学不均匀引起的. 这一实验结果与第五节的理论分析相当一致.

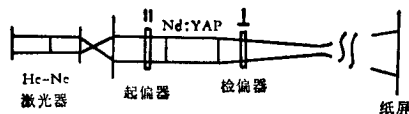


图 2 测量等色线图的实验装置

3. 热透镜效应的实验研究

实验装置与图 2 相似,晶体的 c 轴或 a 轴放在灯平面内.

首先取出偏振器,加上光泵后,在焦距外的纸屏上得到的光强分布是两个椭圆[图 4(a),(d)(见图版 I)]. 椭圆的长短轴分别平行于晶体的 a, c 轴,小椭圆在大椭圆内,二者不相交,它们的长短轴互易. 随着功率增加,两个椭圆同时增大.

在晶体前或后插入偏振器,当偏振方向与 c 轴重合时,只留下长轴与 c 轴平行的椭圆[图 4(b),(c)(见图版 I)],将偏振器转过 90 度,该椭圆消失,出现长轴与 a 轴平行的椭圆[图 4(c),(f)(见图版 I)],它们分别对应于 c 轴和 a 轴的偏振光起聚焦作用. 分别考虑偏振方向平行于 a 轴和 c 轴的入射光在座标轴 a, c 上的聚焦作用,可得到四个焦距,它们与第六节中的 $f_{x=0}(x)$, $f_{x=0}(x)$, $f_{x=0}(z)$ 和 $f_{x=0}(z)$ 相应.

利用图 2 装置,将晶体 c 轴(或 a 轴)放在灯平面内,偏振器偏振方向平行或垂直于 c 轴,在不同输入功率时,用纸屏寻找沿 c 轴或垂直 c 轴方向 He-Ne 激光光斑最窄点的位置,得到上述四个焦距. 图 5 给出它们与输入功率的关系,在对数坐标上 f 与 p 呈直线关系,即可用方程 $f = \alpha p^{-\beta}$ 描述. 从图 5 看到四条直线 β 几乎相等, α 值不同. 与第六节的(6.14)——(6.17)式比较,若令(A.11)式中的 $c_2 = 0$, $C_1 = \frac{\eta p_{in}}{4\pi r_0^2 L} \left(\frac{DN - SM}{\kappa_{11}} - \frac{AM - RN}{\kappa_{33}} \right)$,这样(6.14)——(6.17)式中 $f \propto 1/p$ 即 $\beta = 1$, α 值各异. 这一结果与实验结果相符. 不同处是实验得到 $\beta > 1$,这是由于假定电-热转换系数 η 是常数,实际上,它是输入功率的函数.

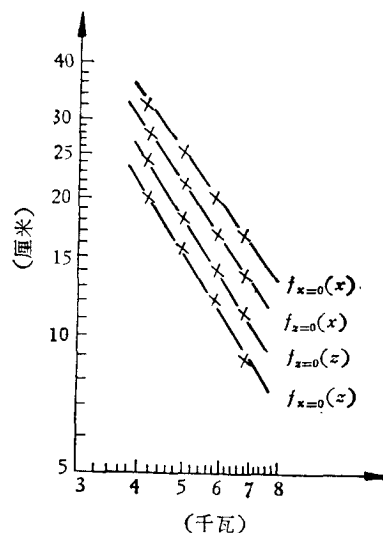


图 5 晶体 c 轴平行灯平面时, $f_{x=0}(z)$, $f_{x=0}(z)$, $f_{x=0}(x)$, $f_{x=0}(x)$ 与输入电功率的关系

八、小 结

已从理论上分析了正交晶系 b 轴 YAP 晶体激励过程产生的热效应,得到了晶体中温度分布、应力-应变分布、双折射效应、热透镜效应以及晶体在正交偏振器间的等色线图等的解析关系式,结果是

1. a, c 轴平面内等温线是一椭圆,在座标轴上温度呈抛物线分布.
2. x 和 z 方向应力、应变是 x^2 和 z^2 的函数,在座标轴上应力、应变呈抛物线分布. y 方向的应变与 xz 无关,热应变不会直接使棒产生棱镜状形变,因而对热聚焦没有贡献.
3. 热应变仅引起折射率大小、形状变化,折射率椭圆主轴方向几乎不变,因而偏振光通过它几乎不退偏.

4. 正交偏振器间 b 轴 YAP 棒的等色线是一簇椭圆, 其长短轴接近晶轴方向.
 5. 沿着 x 和 z 方向的折射率为

$$n(x) = (n_1 - S_1) \left[1 - \frac{\frac{m_1}{\kappa_{11}} + Q_1}{n_1 - S_1} x^2 - \frac{\frac{m_1}{\kappa_{33}} + R_1}{n_1 - S_1} z^2 \right],$$

$$n(z) = (n_3 - S_3) \left[1 - \frac{\frac{m_3}{\kappa_{11}} + Q_3}{n_3 - S_3} x^2 - \frac{\frac{m_3}{\kappa_{33}} + R_3}{n_3 - S_3} z^2 \right],$$

它们分别对沿 x 和 z 方向的偏振光起作用, 可以把它们看作两个二维的厚透镜. 对于每个厚透镜在 x 轴和 z 轴上的聚焦作用是不同的, 可以把它们看作分布常数不同的两个类似透镜介质, 因此可以把含有类似透镜介质谐振腔的计算用于 YAP 激光器.

6. 测定了 b 轴 Nd:YAP 棒热应变诱导折射率椭圆主轴的旋转角、正交偏振器间 YAP 的等色线图以及热焦距, 结果定性地与理论分析相符.

周玉平、于桂芳、黄小良、黄呈辉和吴彩明同志参加了实验工作, 福州大学林鹏程老师提了有益的意见, 表示感谢.

附 录

(1) 热位移弹性势所满足的二阶偏微分方程组的推导

将 (3.4) 和 (3.8) 式代入 (3.7) 式第一式, 得到

$$\frac{1}{AD - BC} \left[D \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial u}{\partial x} - B \frac{\partial w}{\partial z} + MT \right) \right] + G_s \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) = 0. \quad (\text{A.1})$$

将 (3.10) 式代入上式后, 得到

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + R \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + MT \right) = 0. \quad (\text{A.2})$$

因为 φ 是 xz 的函数, 对 x 的偏微分等于零, 括号内的式子可以是 z 的函数, 令其为 $C_1 z^2$, 得到

$$D \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + R \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + MT - C_1 z^2 = 0, \quad (\text{A.3})$$

同理

$$S \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + A \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + NT - C_2 x^2 = 0, \quad (\text{A.4})$$

式中 $R = 2G_s(AD - BC) - B$, $S = 2G_s(AD - BC) - C$, C_1 和 C_2 是积分常数, 在附录的第二部分中看到它们间存在一定的关系, 其值在确定了 YAP 的物理常数后, 可通过实验确定.

(2) 二阶偏微分方程组的求解

令解为

$$\varphi(xz) = \frac{a}{12} x^4 + \frac{b}{2} x^2 + \frac{c}{2} x^2 z^2 + \frac{d}{2} z^2 + \frac{e}{12} z^4. \quad (\text{A.5})$$

代入 (3.11) 式得到

$$Dax^2 + Db + Dcx^2 + Rcx^2 + Rd + Rcz^2 + MT - C_1 z^2 = 0, \quad (\text{A.6})$$

$$Sax^2 + Sb + Scx^2 + Acx^2 + Ad + Aez^2 + NT - C_2 z^2 = 0. \quad (\text{A.7})$$

(A.6) $\times S$ - (A.7) $\times D$, (A.6) $\times A$ - (A.7) $\times R$ 并考虑 (2.2), (2.3) 式, 得到

$$(SR - AD)cx^2 + (SR - AD)d + (SR - AD)ez^2 + DC_2 x^2 - C_1 S z^2 + (SM - DN) \left[T_s - \frac{hr_0^2}{4\kappa_{33}} \left(\frac{x^2}{r_0^2} - 1 \right) - \frac{hx^2}{4\kappa_{11}} \right] = 0, \quad (\text{A.8})$$

$$(AD - RS)ax^2 + (AD - SR)b + (AD - RS)cz^2 + RC_2 x^2 - AC_1 z^2$$

$$+ (AM - RN) \left[T_x - \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \left(\frac{x^2}{r_0^2} - 1 \right) - \frac{hz^2}{4\kappa_{33}} \right] = 0 \quad (\text{A.9})$$

让各变量同次幂的系数相等, 得到

$$a = \frac{(AM - RN) \frac{h}{4\kappa_{11}} - RC_2}{AD - RS}, \quad b = \frac{RN - AM}{AD - RS} \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \right),$$

$$d = \frac{SM - DN}{AD - RS} \left(T_x + \frac{hr_0^2}{4\kappa_{11}} \right), \quad e = \frac{(DN - SM) \frac{h}{4\kappa_{33}} - SC_1}{AD - RS}, \quad (\text{A.10})$$

$$c = \frac{AC_1 + (AM - RN) \frac{h}{4\kappa_{33}}}{AD - RS} = \frac{DC_2 + (DN - SM) \frac{h}{4\kappa_{11}}}{AD - RS}. \quad (\text{A.11})$$

将(A.10)(A.11)式代入(A.5)式, 得(3.12)式. 解的正确性, 可以将它分别代入(3.11)式的两个方程, 并运用(2.4)和(A.11)式, 二阶偏微分方程组的每一方程都成立.

参 考 文 献

- [1] K. Patek, "Glass Lasers", London Iliffe Books, (1970).
- [2] L. M. Osteyink *et al.*, *Appl. Phys. Letters*, **12**(1968), 128.
- [3] J. D. Foster *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **41**(1970), 3656.
- [4] W. Koecher, *Appl. Opt.*, **6**(1970), 1429.
- [5] T. Kimura, *IEEE J. Quantum Electron.*, **QE-7**(1971), 403.
- [6] S. P. Timoshenko, J. N. Goodier "Theory of Elasticity", McGraw-Hill Book Company, Third Edition, (1970).
- [7] 王龙甫编, 弹性理论, 科学出版社, (1978).
- [8] J. F. Nye, "Physical Properties of Crystal", Oxford University Press, (1957).
- [9] A. Gerrard, I. M. Burch, "Introduction to Matrix Method in Optics", John Wiley & Sons, (1975).
- [10] S. E. Miller, *Bell System Tech. Journal*, **44**(1965), 2017.
- [11] 福建物质结构研究所二室一组, 激光, (3)(1975), 33.
- [12] 沈鸿元等, 激光, (5)(1979), 17.

THERMAL EFFECTS IN ORTHORHOMBIC YAP CRYSTALS

SHEN HONG-YUAN

(Fujian Institute of the Structures of Matter, Academia Sinica)

ABSTRACT

The thermal effects arising from the lasing process in orthorhombic YAP crystals have been discussed theoretically in this paper. Mathematical expressions have been given for the thermal distribution, stress-strain distribution, birefringence and thermal lens effect of the YAP crystals as well as the isogyre pattern of a YAP rod placed between crossed polarizers. It is shown that calculated results agree qualitatively with the observed thermal effects.

螺旋晶体

施仲坚 应崇福

(中国科学院声学研究所)

1981 年 1 月 5 日收到

提 要

本文报道关于铌酸锂螺旋晶体的实验事实。这种螺旋晶体就像一根具有一定取向的直晶棒被弯曲盘卷在一个圆柱面上,它不是自发地而是受人工控制形成的。文中并就此螺旋晶体作了一些讨论。

一、引 言

本文报道的是一种形状如螺旋线的铌酸锂单晶体,暂称之为螺旋晶体。这里的螺旋线在几何上指的是圆柱螺旋线这种特定的空间曲线,在螺旋线上任一点的曲率和挠率均为不等于零的常数,在物理上它就像一根按一定取向生长的直单晶棒被规则地盘卷在一个圆柱面上。显然,如果晶棒的直径足够小,已可被视为丝,用机械方法把它盘卷在一个直径足够大的圆柱上是不难的;反之若晶棒的直径较大,要把它盘卷在一个直径较小的圆柱面上,却是一件十分困难的事。因为单晶体的范性形变受其强度的制约,特别是离子晶体是极不易产生范性形变的。

利用导模技术和浮力提拉单晶炉,我们曾经生长出一些具有特殊形状诸如平板形和管形的铌酸锂单晶^[1]。近来,我们研究出一种复合导模技术生长出一些螺旋线的铌酸锂单晶体,其曲率和挠率以及晶棒的直径可以用人工来控制,即这种螺旋晶体不是自发形成的,也不是无规的。Addamiano 曾观察到一些自发生成的圈形晶体^[2,3],材料为 GaAs 和 ZnS,形状无规,尺度微小,圈的直径约只有一至二毫米。我们获得的铌酸锂螺旋晶体多数虽只有一圈左右,但它是圆柱螺旋线上的一部分,其典型的尺寸:圆柱的直径为 15 毫米,螺距为 5 毫米,晶棒的直径为 2 毫米,总长约为 50 毫米。

文中报道了这种螺旋晶体的晶相鉴定和生长取向的基本参量,并就有关结构模型的一些问题进行了讨论。

二、螺旋晶体

螺旋晶体如图 1 所示,它们是按照预定的尺寸形成的。晶体实物的几何精度取决于实验器械的加工精度。图 1 中晶体的直线部分是籽晶,其截面为方形;弯曲部分是螺旋晶体,其截面为圆形。这种螺旋晶体外形的数学形式是圆柱螺旋线,其参数方程为



图1 铌酸锂螺旋晶体

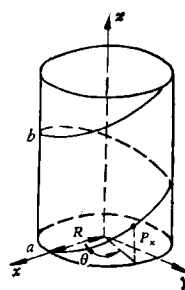


图2 圆柱螺旋线

$$x = R \cos \theta, y = R \sin \theta, z = K\theta, \quad (1)$$

其中 R 为圆柱的半径, K 为圆柱底面旋转角 θ 和螺旋线上某一点 $P_x(x, y, z)$ 沿母线所走过的路径间的比例系数. 其图解如图 2 所示. 图 1 的实物是图 2 中约自 a 至 b 的一个周期. 所得的螺旋晶体, 透明不裂, 其表面上有生长条纹和生长脊, 晶脊的走向随外形而改变. 经测定, 其组份和密度数据与籽晶的偏差在实验误差范围之内, 见表 1. 我们还按图 3 中所示的阴影区 $a, b \cdots f$ 等取其六个部位, 用 X 射线衍射仪分别测定其点阵参数, 精

表1 铌酸锂螺旋晶体的组份和密度

	螺旋晶体	籽晶
$\text{Li}_2\text{O}(\%)$	9.5	9.6
$\rho (10^3 \text{ 千克/米}^3)$	4.67	4.64

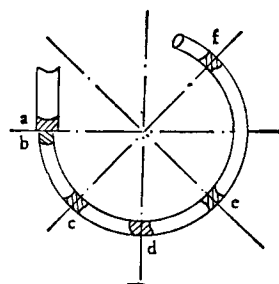


图3 螺旋晶体点阵参数测定的部位

表2 铌酸锂螺旋晶体的点阵参数 (22°C)

样品来源	晶系 点阵参数	菱形		六角		
		a_R	α_R	a_H	c_H	α_H
a		5.496	55°54'	5.156	13.839	119°49'
b		5.505	55°48'	5.151	13.897	119°57'
c		5.507	55°50'	5.158	13.898	120°2'
d		5.496	55°50'	5.143	13.877	119°54'
e		5.500	55°45'	5.149	13.890	120°12'
f		5.509	55°51'	5.159	13.901	120°13'
Abrahams ^[4]		5.494	55°52'	5.148	13.863	—

度为千分之二, 所得结果列于表 2. 数据表明, 在测定的精度内, 它们的结构是相同的, 测定时, 在每一阴影区中, 取样是随机的. 因此我们得到的第一个结论是: 一支人工生长的螺圈形铌酸锂单晶体已经形成.

最后进行结构取向的测定. 图 4 是螺旋铌酸锂单晶在籽晶 $(11\bar{2}0)$ 面里的投影示意图, 籽晶的取向预先给定, 如图 4 所示. 测定的

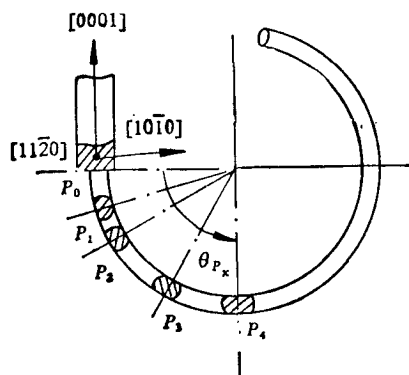


图 4 螺旋晶体结构取向测定的部位

部位是图 4 中的五个阴影区 P_0 至 P_4 , 其中 P_0 在籽晶上. 首先, 测定一支螺晶的 $[0001]$ 走向, 但实验得不到明显的衍射峰, 使这项测定变得十分困难, 其原因将在下节讨论. 接着, 测定另一支螺晶的 $(11\bar{2}0)$ 取向情况. 实验中, 欲测平面是以 P_0 处为基准面一起磨制出来的; 然后依次测定了磨制面上相应于各欲测部位的 $(11\bar{2}0)$ 面衍射角. 今将各点衍射方位与 P_0 处衍射方位的差值即夹角列于表 3. 表 3 中的实验值与计算值基本相符. 基

于对晶体外形和结构取向的了解, 我们得到第二

个结论是: 一支晶面取向随外形按柱面螺旋线规律逐渐变化的铌酸锂螺旋晶体已经形成.

表 3 铌酸锂螺旋晶体 $(11\bar{2}0)$ 取向的测定

测定部位 P_x		P_0	P_1	P_2	P_3	P_4
相应的 θ_{P_x}		0	$\frac{\pi}{10}$	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{2}$
衍射方位差	实验的	10'	34'	1°48'	5°30'	8°55'
	理论的	0'	1°54'	3°7'	6°2'	8°33'

三、取向分析

这里将进行表 3 中理论值的分析. 今取螺旋晶体上某一点 P_x 附近的段元, 如图 5 所示. P_x 点的伴随三面形由图 5 中的虚线表示, 它有三个特征向量, 即切线 t 、主法线 n 和从法线 b . 实验是这样设计的, 籽晶与螺旋晶体的接触处为 P_0 点, 具有

切线 $t|_{P_0} \perp (0001)$,

主法线 $n|_{P_0} \perp (10\bar{1}0)$,

从法线 $b|_{P_0} \perp (11\bar{2}0)$.

为分析方便, 取 (1) 式的向量形式, 即

$$r = Re(\theta) + K\theta k, \quad (2)$$

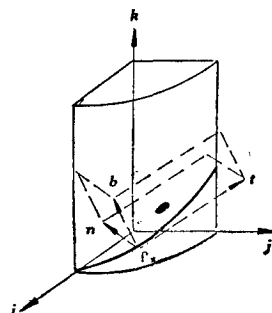


图 5 螺旋晶体上某一 P_x 点处的微分几何特性

$$\mathbf{e} = \mathbf{i} \cos \theta + \mathbf{j} \sin \theta, \quad (3)$$

于是

$$\mathbf{t} = \frac{R}{\sqrt{R^2 + K^2}} \mathbf{e} \left(\theta + \frac{\pi}{2} \right) + \frac{K}{\sqrt{R^2 + K^2}} \mathbf{k}, \quad (4)$$

$$\mathbf{n} = -\mathbf{e}(\theta), \quad (5)$$

$$\mathbf{b} = -\frac{K}{\sqrt{R^2 + K^2}} \mathbf{e} \left(\theta + \frac{\pi}{2} \right) + \frac{R}{\sqrt{R^2 + K^2}} \mathbf{k}. \quad (6)$$

这应当是螺旋晶体形成过程中三个特征向量的变化规律。我们来看向量 $\mathbf{b}$ 的变化规律，把 (3) 式代入 (6) 式可得

$$\mathbf{b} = -\frac{K}{\sqrt{R^2 + K^2}} \left[\mathbf{i} \cos \left(\theta + \frac{\pi}{2} \right) + \mathbf{j} \sin \left(\theta + \frac{\pi}{2} \right) \right] + \frac{R}{\sqrt{R^2 + K^2}} \mathbf{k}. \quad (7)$$

因为

$$\sin \left(\theta + \frac{\pi}{2} \right) = \cos \theta, \quad \cos \left(\theta + \frac{\pi}{2} \right) = -\sin \theta, \quad (8)$$

并令

$$\frac{K}{\sqrt{R^2 + K^2}} = K_0, \quad \frac{R}{\sqrt{R^2 + K^2}} = R_0. \quad (9)$$

则 (7) 式变成

$$\mathbf{b} = -K_0[-\mathbf{i} \sin \theta + \mathbf{j} \cos \theta] + R_0 \mathbf{k}. \quad (10)$$

在特殊的情况下，

$$\begin{aligned} \mathbf{b} &= -K_0 \mathbf{j} + R_0 \mathbf{k} & \text{当 } \theta = 0, \\ \mathbf{b} &= K_0 \mathbf{i} + R_0 \mathbf{k} & \text{当 } \theta = \pi/2, \\ \mathbf{b} &= K_0 \mathbf{j} + R_0 \mathbf{k} & \text{当 } \theta = \pi, \\ \mathbf{b} &= -K_0 \mathbf{i} + R_0 \mathbf{k} & \text{当 } \theta = 3\pi/2. \end{aligned} \quad (11)$$

这些结果可用图 6 表示。这是向量 $\mathbf{b}$ 在螺晶中的变化概貌。

进一步求 P_x 处与 P_0 处从法线的夹角。

因为

$$\cos(\widehat{\mathbf{b}_{P_0}, \mathbf{b}_{P_x}}) = \frac{\mathbf{b}_{P_0} \cdot \mathbf{b}_{P_x}}{|\mathbf{b}_{P_0}| |\mathbf{b}_{P_x}|}. \quad (12)$$

所以

$$(\widehat{\mathbf{b}_{P_0}, \mathbf{b}_{P_x}}) = \arccos \frac{K_0^2 [\sin \theta_{P_0} \sin \theta_{P_x} + \cos \theta_{P_0} \cos \theta_{P_x}] + R_0^2}{\sqrt{K_0^2 (\sin^2 \theta_{P_0} + \cos^2 \theta_{P_0}) + R_0^2} \sqrt{K_0^2 (\sin^2 \theta_{P_x} + \cos^2 \theta_{P_x}) + R_0^2}}. \quad (13)$$

由于 $\theta_{P_0} = 0$ ，并 $\sin^2 \theta + \cos^2 \theta = 1$ ，最后得

$$(\widehat{\mathbf{b}_{P_0}, \mathbf{b}_{P_x}}) = \arccos \frac{K_0^2 \cos \theta_{P_x} + R_0^2}{K_0^2 + R_0^2}. \quad (14)$$

实验时，圆柱的直径为 15 毫米，螺距为 5 毫米，取这些原始数据和表 3 中的各 θ_{P_x} 值，进行数值计算，便可求得表 3 中的理论值。表 3 中实验值与理论值的差异，主要是在实际样品磨制操作时引起的误差。

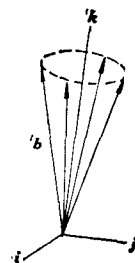


图 6 螺晶中向量 $\mathbf{b}$ 的变化规律

四、讨 论

根据上面得到的结果,从晶体学的角度,可以提出一些有趣的问题.首先是关于螺旋晶体的结构模型,结构单元似乎应按图 7 所示的模型堆砌起来,即晶胞的取向随螺晶的形成而逐渐地改变.这样,一支宏观尺度的弯曲晶棒,其内外侧的形变会有相当大的差异,各层的形变亦各不相同.那么,晶胞有否畸变呢?若按畸变晶胞堆砌的模型来估算文中给出的实例,可以估算出六角点阵 C_H 参数的应变为 $\Delta C_H/C_H \approx 10^{-1}$,这是一个相当可观的量,即使是保守的估算亦应有 5% 的应变.表 2 中的实测值是从各取样区中随机取样测定得到的值,可知,在实验的精度内并没有观察到这个畸变.于是我们似乎可以否定螺旋晶体的结构模型是由畸变的晶胞堆砌而成的.

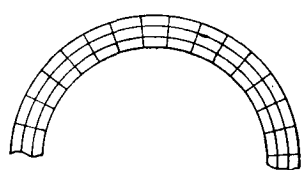


图 7 螺旋晶体结构的物理模型

根据位错理论,当晶体中存在一个刃型位错,就可使晶体产生弯曲.若取刃型位错的平均位移为基本平移量,其值为 3 埃,则可以估算出螺旋晶体的位错密度为 10^{14} 厘米 $^{-2}$,这个数值比以往熟知的范性形变晶体中的位错密度还要大两个数量级.这有待实验来判断.上面曾提到在进行法平面取向测定时所遇到的困难,是否就是由于这个高刃型位错密度所造成.

此外,螺旋晶体的应变能如何估算,它与晶格能是否相容,螺旋晶体是否应该并如何引入应变应力及断裂强度,这些都是值得探讨的问题.按习惯,固体的表面能是由液体的表面张力用外推法求解的.我们曾测定过铈酸锂熔体的表面张力^[1],于是不难求得铈酸锂晶体的表面能为 196 达因/厘米.若取铈酸锂晶格中的原子间距为 3 埃,则按 Polanyi 理论可以粗略地估算出铈酸锂晶体的断裂强度为 1.5×10^3 千克/毫米 2 .因此,一支直径为 2 毫米,长为 50 毫米取向一定的铈酸锂直晶棒,要弯成如图 1 所示的实物是不可能的;然而我们通过生长毕竟已形成了这种螺晶.其强度机制又是什么,这一系列问题均需进一步探讨.

我们还初步观察到了铈酸锂螺旋晶体较复杂的压电活动性,其详情及其可能的用途将进一步研究.

我们还初步观察到了铈酸锂螺旋晶体较复杂的压电活动性,其详情及其可能的用途将进一步研究.

本工作中样品组份的分析得到物理研究所张干南同志的协助,晶胞参数测定得到生物物理研究所奚士琪和伍伯牧同志的协助,取向测定得到北京无线电元件八厂黄钟和孔晓娟同志的协助,特此致谢.

参 考 文 献

- [1] Z. J. Shi, Z. G. He and C. F. Ying *Ultrasonics*, **18**(1980), 57.
- [2] A. Addamiano, *Nature*, **179**(1957), 493.
- [3] A. Addamiano, *J. Crystals Growth*, **11**(1971), 351.
- [4] S. C. Abrahams and J. L. Bernstein, *J. Phys. Chem. Solids*, **28**(1967), 1685.

SPIRAL CRYSTALS

SHI ZHONG-JIAN YING CHONG-FU

(Institute of Acoustics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The object of this article is to present the experimental facts about the spiral crystals. The spiral crystal is just like a straight crystal bar with definite orientation coiled on a cylindrical surface. It is not formed spontaneously, but is formed under control. Some problems on spiral crystal are discussed.

1) 本实验用的样品由建筑材料工业部人工晶体研究所提供。

层错(如 D);在 A 处可看到杂质沉淀物在晶界上引起很强的应力.在图的上部和右上边缘是严重的层错区.图 3 是 $m(10\bar{1}0)$ 片的形貌图(见图版 III),可以看到位错线主要从靠近籽晶部分产生,然后向上延伸;层错出现在生长后期,与 c 轴约成 13° .同时,还观察到生长层和边界层错.图 4 是 $R(10\bar{1}1)$ 片形貌图(见图版 III).所得结果与图 2 和图 3 相同.为了探明片状层错的空间形态和成因,我们还拍摄了一组 $(2\bar{1}\bar{1}0)$ 切片的 $[0003]$ 和 $[01\bar{1}0]$ 衍射形貌图; $R(10\bar{1}1)$ 片 $[\bar{1}011]$ 衍射的立体对和 $m(10\bar{1}0)$ 片 $[0003]$ 衍射的立体对以及 (0001) 片的 $[01\bar{1}1]$ 衍射形貌图.离子探针分析是在 LT-1 型离子探针质谱微分析仪上进行,束宽 $50\mu\text{m}$,分辨率为 10^{-7} .

三、讨 论

水晶属三方晶系,结构比金刚石型复杂,因此,其缺陷情况也更为多变,本文仅扼要讨论实验中观察到的缺陷.

1. 片状层错

从图 2 至 4 可以观察到,沿 $[11\bar{2}0]$ 和 $[01\bar{1}0]$ 方向的晶界上存在着片状层错(如图 2 中 D).它们出现在晶体生长后期,经过一段发育后,其形状、大小基本保持不变,一直延至晶体最终生长表面,层错面与生长方向 c 轴夹角约为 13° .从 X 射线衍射理论可知,当错层的厚度与 X 射线的消光距离可比拟时,晶格周期性的破坏才可视作突然的.根据消光距离公式

$$\frac{1}{\xi_g} = \frac{e^2}{mc^2} \frac{F\lambda c}{\pi V \cos \theta_B},$$

其中 $e^2/(mc^2)$ 为电子半径; F 为晶体结构因子; λ 为 X 射线波长; c 为偏振因子; V 为晶体单胞体积; θ_B 为衍射角.我们的实验条件对 $[0003]$ 衍射, ξ_g 为 $205\mu\text{m}$; $[10\bar{1}1]$ 衍射, ξ_g 为 $45\mu\text{m}$. Penning 和 Goemans^[8] 讨论了形成位错反差的极限厚度.我们借用其分析结果并从经验可知,要获得缺陷的反差,其缺陷厚度最小极限为 $\frac{1}{3} \xi_g$.从所得的形貌图分析,

层错厚度约为百微米量级.层错的存在使得晶格点阵的周期性遭受破坏.由于晶面间距和取向失配造成局部应力,从而使层错两侧的晶格产生相同的取向变化, X 射线通过层错时就会发生位相差和额外衍射,造成层错衍衬(见图 2).对某些衍射,形变区中部的衍射强度比两侧低,呈现双线象[见图 2(f)].

从图 2 看到,对 $[11\bar{2}0]$ 衍射层错象沿 $[11\bar{2}0]$ 方向部分衍衬强度完全消光,对 $[1\bar{1}00]$ 衍射为极大,而对其它两个 $[10\bar{1}0]$, $[01\bar{1}0]$ 和 $[2\bar{1}\bar{1}0]$, $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 只是部分减弱. Authier^[9], Kato^[10] 等应用球面波衍射理论对缺陷引起的 X 射线衍射强度变化作了大量的理论推导.本文只作最简单的分析.对层错矢量为 $\mathbf{f}$ 的层错, X 射线在层错两侧衍射所产生的位相差为 $\alpha = (2\pi\mathbf{g} \cdot \mathbf{f})$, 其中 $\mathbf{g}$ 为衍射矢量.当 $\mathbf{f}$ 为简单位移时,由 X 射线衍射强度消光定律可以决定 $\mathbf{f}$ 的取向.但对于复合位移层错, $\mathbf{g} \cdot \mathbf{f} = 0$ 的条件不存在,借用螺旋位错衍衬强度的计算机计算结果^[11],表明本实验观察到的层错包含 $[1\bar{1}00]$ 和 $[0001]$ 分量.

从晶体位错理论^[12]得知,对六角晶系的晶体,位错的 Burgers 矢量最常见为 $\frac{1}{3}[11\bar{2}0]$ 型. 当晶格参数 c/a 值较小时, $\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0]$ 位错很容易在棱柱面上发生分解,即

$$\frac{1}{3}[\bar{1}2\bar{1}0] \rightarrow \frac{1}{3}[\bar{1}100] + \frac{1}{3}[01\bar{1}0].$$

这样,在位错两侧晶格产生矢量为 $A\sigma$ 的切变(见图 5). 如果有两个位错 AB 和 AC , 其相互作用, AB 分解为 $A\sigma + \sigma B$, 而 AC 分解为 $\sigma C + A\sigma$. 然后 σB 和 σC 相互作用,即有

$$\sigma B + \sigma C \rightarrow A\sigma,$$

其结果产生一个层错. 其 Burgers 矢量增加为

$$A\sigma + \sigma S = AS,$$

$$\frac{1}{3}[\bar{1}100] + \frac{1}{2}[0001] \rightarrow \frac{1}{6}[\bar{2}203]$$

上述分析结果与实验相符.

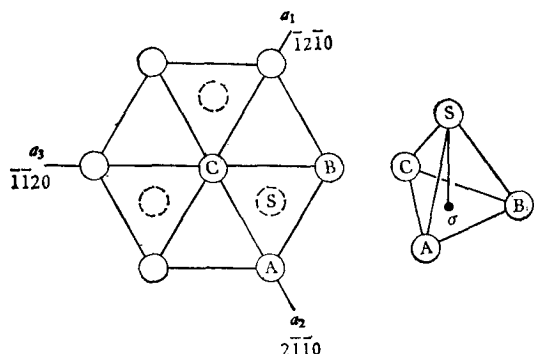


图 5 六角结构晶体位错模型示意图

大量实验证明,人工水晶在一定生长条件下出现明显的胞状结构,晶体的某些表面为许多凸起的三角形生长丘,称为卵石状结构^[13]. 这种胞状结构的小面是晶体在该生长条件下的某些显露面在溶液中推移的结果. 显露面随生长条件变化而变,但又具有一定的结晶学指数和对称分布的特点^[14],其底面多为等边三角形(见图 6 中 C),也有少数其底边不是等边三角形(见图 6 中 A). z 切籽晶生长的水晶(0001)面形貌图揭示了多边形胞状晶界结构,这种结构一直延伸到晶体小丘形外表面. Brown 和 Thomas^[15] 指出,小丘状表面与铝杂质有关,铝杂质浓度越高,小丘表面越明显. 离子探针分析结果表明: 实验样品中主要的杂质是铝、钠、钾等,在晶体中其含量很小,对晶格参数的影响不大. 但层错处杂质浓度比晶体正常含量高很多,如铝高十倍;钠高十四倍;钾高四倍. 这表明在生长后期,由于杂质浓度、高压釜内温度、压力等变化,使晶体生长偏离其最佳生长条件¹⁾,甚至短时间地进入不稳定生长区. 生长条件的波动除造成生长条纹外,还使杂质原子容易在胞

1) 中国科学院物理研究所晶体学研究室水热晶体生长组,第一届全国晶体生长会议报告(1965).

状结构小晶面上和生长丘相邻的胞壁间富集、沉积。由于杂质原子的填隙,使晶格点阵产生不均匀的膨胀和歪扭畸变,并导致大量位错向该区域运动、集聚,在这些缺陷共同作用下产生前述的点阵位移而形成层错。从图 4 可看到层错是在晶界面上,并沿 $[01\bar{1}0]$ 方向,这证实了上述分析。对比图 2 和图 4,可得到层错的空间形态。层错经腐蚀后成为蚀沟,一直延伸至表面生长丘的谷底。这些层错在晶体外表面的露头正是那些底面不是等边三角形小丘的长底边。实验指出,如果籽晶取向偏离 $[0001]$,由生长动力学可知,偏离越大各生长面的生长速率差越大,越容易出现层错。从而生长丘的不对称也越明显。由此可见,切准籽晶,保持最佳生长条件的稳定,是获得大块优质人工水晶的关键,必须给予足够的重视。

从图 2 和图 4 可以看到 C 处是晶体沿 z 向生长部分与 z 面及 r 面的边界。大量位错和杂质在此边界上聚集,形成一个强应力区。因此,在形貌图上显现出明显的衍衬。在边界的对应一面平滑,这反映 z 面取向生长的开始,取向生长区的衬度比主体弱,这是由于取向失配而偏离 Bragg 衍射条件所致,其偏离值约为 $1'$ 。实验表明, z 面小台阶的出现与籽晶偏离 (0001) 面有关。由于这一偏离,在 $[01\bar{1}0]$ 方向出现边峰结构(见图 6B)。它是由两族高指数晶面构成,这是生长速率比主体快的区域。边峰结构小台阶与主体的交界就是形貌图所示的强烈层错区。

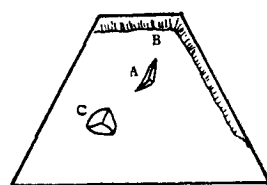


图 6 (0001) 面上三方丘结构和 z 面小台阶边峰结构示意图

2. 位错线

图 3 是 $m(10\bar{1}0)$ 切片的形貌图。它给出了晶体沿生长方向缺陷分布情况,籽晶靠近图的下方。可以看到,生长初期位错密度较高。大部分起源于籽晶和其附近的沉淀物,然后成束状发散向上延伸,其走向与 $[0001]$ 的夹角约为 10° 。随着晶体的生长,部分位错被钉扎在沉淀物、晶界、层错等缺陷周围,位错密度降低。但是由于生长条件的变化,晶体上部沉淀物、包裹物增多,甚至出现层错。离子探针分析表明:晶体上部的杂质浓度约为下部的五倍,这些缺陷也可能成为新的位错源。图 3(a) 中的水平波纹线是生长条纹,它与生长温度变化相对应。生长条纹在 $[0003]$ 衍射中有强的衬度,而在 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 衍射中完全消光。说明生长条纹相应的晶面晶格参数的位移方向垂直于生长条纹,即垂直于 (0001) 面;而没有沿 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 方向的位移分量。其次,由于沿生长层与样品表面交线的应力弛豫所引起的位移只产生绕 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 方向的晶格转动,这种微转动不破坏 Bragg 衍射条件。

对比图 3(a) 和 (b),发现大多数位错线对 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 衍射具有强的衍衬和较宽的位错象,而对 $[0003]$ 衍射衍衬较弱甚至消光或呈较窄的位错象。这是由于 $[0003]$ 衍射比 $[\bar{1}2\bar{1}0]$ 衍射具有较大的 $g \cdot b$ 值和消光距离。大部分位错线的 Burgers 矢量为 $[\bar{1}2\bar{1}0]$,它们在 $[0003]$ 衍射中消光,只有少部分位错线的 Burgers 矢量含有 c 分量,故它们在 $[0003]$ 衍射中仍有弱的衍衬显示。从所得的形貌图可以看到,晶体不同部位位错密度不同,其平均值约为 $200/\text{cm}^2$ 。

从图 4 可观察到在晶体的下部(即靠近籽晶部分)位错分布是杂乱的,但随着晶体沿