

在具有长程应变场的 GGG 晶体中螺型位错的应力双折射像

葛传珍 张京¹⁾ 冯端

(南京大学物理系)

1986 年 9 月 5 日收到

提 要

基于弹性各向同性和弹光各向异性的考虑, 获得了长程应变场中沿位错线观察的螺型位错双折射像的解析表达式以及其计算机模拟像, 成功地解释了 GGG 晶体中实验观察到的螺型位错像所具有的两瓣一黑一白的衬度特征.

引 言

最近, 葛传珍等在 YAG 和 GGG 晶体中获得了 Burgers 矢量为 $\frac{a}{2} \langle 111 \rangle$ 的单个螺型位错的应力双折射像 (viewed end-on), 并基于弹光各向异性的考虑, 解释了像的衬度分布及其消光规律^[1,2]. 上述理论分析, 虽然正确地解释了单个螺型位错应力双折射像的等强度曲线的形状及其消光规律, 然而不能解释实验观察到的螺型位错双折射像的两叶花瓣具有一黑一白的衬度特征. 本文进一步考虑了长程应变场对衬度的影响, 得到了长程应变场中纯螺型位错双折射像的解析式及计算机模拟像, 其结果与实验相符.

长程应变场中螺型位错的双折射像

应力双折射

假定电磁波在均匀的各向异性介质中的传播规律在受应力作用下的固体中仍然适用, 则长程应变场与位错应变场将通过弹光效应只改变折射率椭球主轴的大小与方向. 在上述应变场中折射率椭球方程为

$$B_1x^2 + B_2y^2 + B_3z^2 + 2B_4yz + 2B_5zx + 2B_6xy = 1,$$

其中系数 $B_m (m = 1, 2, \dots, 6)$ 为介电张量 $\epsilon_m (m = 1, 2, \dots, 6)$ 的逆张量, 在主轴坐标系中, 这两个张量同时对角化, 此时有

$$B_m = \epsilon_m^{-1} = n_m^{-2} \quad (m = 1, 2, 3),$$

¹⁾ 南京大学物理系固体物理专业 85 届毕业生.

$n_m (m = 1, 2, 3)$ 为晶体的三个主折射率. 在未受应力无缺陷的立方晶体中, 有 $n_1 = n_2 = n_3 = n_0$, 表明立方晶体在光学上是各向同性的. 应变场中折射率椭球方程的系数可表示为

$$B_m = B_m^0 + \Delta B_m \quad (m = 1, 2, \dots, 6), \quad (1)$$

其中 $\Delta B_m (m = 1, 2, \dots, 6)$ 表征长程应变场和位错应变场通过弹光效应所引起的折射率椭球畸变. 若只考虑线性变化, 则

$$\Delta B_m = P_{mn}(e_n^l + e_n^d) \quad (m, n = 1, 2, \dots, 6), \quad (2)$$

其中 e_n^l 和 e_n^d 分别为长程应变场和位错应变场, P_{mn} 为弹光系数. 于是在应力作用下, 折射率椭球的三个主折射率可由下列久期方程给出^[3]:

$$\begin{pmatrix} B_1 - \frac{1}{n^2} & B_6 & B_5 \\ B_6 & B_2 - \frac{1}{n^2} & B_4 \\ B_5 & B_4 & B_3 - \frac{1}{n^2} \end{pmatrix} = 0. \quad (3)$$

若光沿 z 轴传播, 样品表面为 $x-y$ 面, 则 (3) 式可简化为^[4]

$$\begin{pmatrix} B_1 - \frac{1}{n^2} & B_6 \\ B_6 & B_2 - \frac{1}{n^2} \end{pmatrix} = 0. \quad (4)$$

此为关于 $(1/n^2)$ 的二次代数方程, 有两个根分别为 n' 和 n'' . 由此得应力双折射为

$$\begin{aligned} n' - n'' &= (n_0^3/2)[(B_2 - B_1)^2 + 4B_6^2]^{1/2}, \\ \alpha &= \frac{1}{2} \tan^{-1}[2B_6/(B_2 - B_1)], \end{aligned} \quad (5)$$

其中 α 为坐标轴 x 与椭圆(折射率椭球与 $x-y$ 面的交迹)主轴间夹角.

正交偏光下双折射引起的衬度为^[5]

$$I = a^2 \sin^2 2\varphi \cdot \sin^2(\delta/2), \quad (6)$$

其中 a 为入射偏振光振幅, φ 为起偏器与椭圆主轴夹角, δ 为寻常光与异常光间的位相差. 若样品厚为 Δl , 入射波长为 λ , 应力双折射不是坐标 z 的函数, 则

$$\delta = \frac{2\pi}{\lambda} (n' - n'') \Delta l = \frac{\pi \Delta l n_0^3}{\lambda} [(B_2 - B_1)^2 + 4B_6^2]^{1/2}. \quad (7)$$

通常 δ 较小, $\sin \frac{\delta}{2} \approx \left(\frac{\delta}{2}\right)$. 若起偏器与坐标轴 x 的夹角为 β , 则有 $\varphi = \alpha + \beta$, 于是

(6) 式可写为

$$\begin{aligned} I &= \frac{\pi^2 a^2 \Delta l^2 n_0^6}{4\lambda^2} [(B_2 - B_1)^2 + 4B_6^2] \sin^2(2\beta + 2\alpha), \\ 2\alpha &= \tan^{-1}[2B_6/(B_2 - B_1)]. \end{aligned} \quad (8)$$

应变场

通常定义 Zener 比 A 来表征立方晶体弹性的各向异性, 对弹性各向同性材料, 有

$A = 1$, 而 GGG 晶体的 Zener 比 $A = 1.049^{[6]}$, 故可以将其弹性看为各向同性。取坐标轴 z 平行于位错线, Burgers 矢量为 b 的螺型位错的应变分量为

$$e_{23} = \frac{b}{4\pi} \cdot \frac{x}{x^2 + y^2}, \quad e_{13} = -\frac{b}{4\pi} \cdot \frac{y}{x^2 + y^2}. \quad (9)$$

假定晶体中存在的长程应变场是平面应变场, 且平行于晶片表面 (x - y 平面)。其位移场为 $u_0 \hat{\lambda}$, $\hat{\lambda}$ 与 x 轴间的夹角为 Φ , 则长程应变分量为^[7]

$$e_{11} = u_0 \cos^2 \Phi, \quad e_{22} = u_0 \sin^2 \Phi, \quad e_{12} = \frac{1}{2} u_0 \sin 2\Phi. \quad (10)$$

为了和工程应变一致以及便于矩阵运算, 按惯例将应变分量表示为^[8,9]

$$e_1 = e_{11}, \quad e_2 = e_{22}, \quad e_3 = e_{33}, \quad e_4 = 2e_{23}, \quad e_5 = 2e_{13}, \quad e_6 = 2e_{12}. \quad (11)$$

长程应变场中 $\frac{a}{2}$ [111] 螺型位错的双折射像

GGG 等石榴石晶体中 $\frac{a}{2}$ $\langle 111 \rangle$ 螺型位错的双折射像的衬度是来源于该类晶体的弹光各向异性^[1,2], 这类晶体的弹光系数为四阶张量, 具有三个独立常数, 张量的具体形式因所选取的坐标系而异; 对立方晶体通常选取三个立方轴为坐标轴, 此时张量具有较为简单的形式, 参阅附录中 A。为了分析 Burgers 矢量为 $\frac{a}{2}$ $\langle 111 \rangle$ 螺型位错的双折射像, 选取坐标轴 z 平行于位错线, 即选取 $[1\bar{1}0]$, $[11\bar{2}]$, $[111]$ 为 x , y , z 轴; 在相应坐标系中的弹光张量参阅附录中 B。

将应变分量的表示式 (9), (10), (11) 以及相应坐标系中的弹光张量, 代入 (2) 和 (1) 式, 得长程应变场和 $b = \frac{a}{2}$ $\langle 111 \rangle$ 螺型位错应变场所引起的弹光效应 ΔB_m 和 B_m ($m = 1, 2, \dots, 6$)。这里只给出与双折射像有关的 B_1 , B_2 和 B_6 的表达式

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{1}{n_0^2} + \frac{1}{2} (P_{11} + P_{12} + 2P_{44}) u_0 \cos^2 \Phi + \frac{1}{6} (P_{11} + 5P_{12} - 2P_{44}) u_0 \sin^2 \Phi \\ &\quad + \frac{\sqrt{2}b}{12\pi} (P_{11} - P_{12} - 2P_{44}) \cdot \frac{x}{x^2 + y^2}, \\ B_2 &= \frac{1}{n_0^2} + \frac{1}{6} (P_{11} + 5P_{12} - 2P_{44}) u_0 \cos^2 \Phi + \frac{1}{2} (P_{11} + P_{12} + 2P_{44}) u_0 \sin^2 \Phi \\ &\quad - \frac{\sqrt{2}b}{12\pi} (P_{11} - P_{12} - 2P_{44}) \cdot \frac{x}{x^2 + y^2}, \\ B_6 &= \frac{1}{6} (P_{11} - P_{12} + 4P_{44}) u_0 \sin 2\Phi - \frac{\sqrt{2}b}{12\pi} (P_{11} - P_{12} - 2P_{44}) \cdot \frac{y}{x^2 + y^2}. \end{aligned} \quad (12)$$

将 (12) 式代入 (8) 式, 则得长程应变场中 $\frac{a}{2}$ [111] 螺型位错的沿位错线观察的双折射像的衬度分布

$$I = \frac{\pi^2 a^2 \Delta l^2 n_0^2}{36 \lambda^2} \left\{ \left[u_0 (P_{11} - P_{12} + 4P_{44}) \cos 2\Phi + \frac{\sqrt{2}b}{2\pi} (P_{11} - P_{12} - 2P_{44}) \frac{x}{x^2 + y^2} \right]^2 + \left[u_0 (P_{11} - P_{12} + 4P_{44}) \sin 2\Phi - \frac{\sqrt{2}b}{2\pi} (P_{11} - P_{12} - 2P_{44}) \frac{y}{x^2 + y^2} \right]^2 \right\} \sin^2 (2\beta + 2\alpha),$$

$$2\alpha = \tan^{-1} \left[\frac{-\sqrt{2} (P_{11} - P_{12} - 2P_{44}) b y + 2\pi (x^2 + y^2) (P_{11} - P_{12} + 4P_{44}) u_0 \sin 2\Phi}{-\sqrt{2} (P_{11} - P_{12} - 2P_{44}) b x - 2\pi (x^2 + y^2) (P_{11} - P_{12} + 4P_{44}) u_0 \cos 2\Phi} \right]. \quad (13)$$

若取 x 轴为极坐标轴, (13) 式可用极坐标 (r, θ) 来描述.

$$I = \frac{\pi^2 a^2 \Delta l^2 n_0^2}{36 \lambda^2} \left\{ u_0^2 (P_{11} - P_{12} + 4P_{44})^2 + \frac{\sqrt{2}}{\pi} u_0 b (P_{11} - P_{12} - 2P_{44}) \cdot (P_{11} - P_{12} + 4P_{44}) (\cos(2\Phi + \theta)/r) + \frac{b^2}{2\pi^2} (P_{11} - P_{12} - 2P_{44})^2 / r^2 \right\} \cdot \sin^2 (2\beta + 2\alpha),$$

$$2\alpha = \tan^{-1} \left[\frac{-\sqrt{2} (P_{11} - P_{12} - 2P_{44}) b \sin \theta + 2\pi r (P_{11} - P_{12} + 4P_{44}) u_0 \sin 2\Phi}{-\sqrt{2} (P_{11} - P_{12} - 2P_{44}) b \cos \theta - 2\pi r (P_{11} - P_{12} + 4P_{44}) u_0 \cos 2\Phi} \right]. \quad (14)$$

从 (13) 式或 (14) 式中可以看到, 若 $u_0 = 0$, 即晶体中不存在长程应变场, (13) 和 (14) 式退化为文献 [1, 2] 中所给出的螺位错双折射像的表达式. 此时在 (14) 式强度表达式等号右端括号中只保留第三项, 此项即为无长程应变场时螺位错的双折射像. 若 $P_{11} - P_{12} - 2P_{44} = 0$, 即 $P_{11} - P_{12} = 2P_{44}$, 这表征晶体为各向同性的弹光介质, 此时 (14) 式强度表达式等号右端括号中只保留第一项, 且有 $\alpha = -\Phi$, 此为长程应变场所产生的衬度, 且为均匀衬度.

结 果 与 讨 论

如前所述, (14) 式等号右端括号中第一项是长程应变场单独存在时所产生的均匀衬度, 在双折射像中表现为背景衬度; 括号中第三项是螺位错单独存在时 (不存在长程应变场时) 所产生的衬度, 该项总是保持正值; 而第二项可为正值或负值. 当第二项为负值且其绝对值大于第三项时, 则其强度将低于背景强度, 其像表现为黑色. 因而改变长程应变场的大小, 即适当地选择参量 u_0 , 可以得到如实验所得到的具有一黑一白两瓣的螺型位错双折射像. 反之, 由此可以估计长程应变场的大小, 即估计 u_0 的大小.

基于 (13) 式, 对存在长程应变场的 GGG 晶片中的 $\frac{a}{2}$ [111] 螺型位错的双折射像进行了计算机模拟. GGG 的弹光系数为 $P_{11} = -0.086$, $P_{12} = -0.027$, $P_{44} = -0.078^{[6]}$, 值得注意的是只当选取长程应变场的参量为 $u_0/b = 15 \sim 20\%$ 时, 计算机模拟

像才具有一黑一白的衬度特征, 而图 1 (见图版 I) 中取 $u_0/b = 19.6\%$, $\Phi = 45^\circ$. 图 2 (见图版 II) 为 GGG 晶体中 $\frac{a}{2} [111]$ 螺型位错的实验观察结果. 对比图 1 和图 2, 可以看到两者都是两叶花瓣, 都具有一黑一白的衬度特征. 两图中还给出了相对于起偏器为不同角度 β 时的模拟像与观察像, 两者的等强度曲线都是两相切于原点的圆, 当样品相对于起偏器绕 z 轴(位错线)旋转 β 角, 模拟像与观察像都旋转三倍 β 角, 因而当 $\beta = 120^\circ$ 时, 模拟像和观察像还原.

上述的理论结果与观察结果相符, 说明了螺型位错双折射像具有一黑一白的衬度特征是长程应变场所致, 证实了文献[1,2]中的猜测. 并且还可以估计出, 该样品中长程应变场中的原子位移 u_0 约为位错 Burgers 矢量的 15~20%.

感谢邱燕和吕鹏同志在计算机模拟工作中给予的支持和帮助.

附 录

不同坐标系中的弹光系数

A 标准坐标系 $[100], [010], [001]$

$$\begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{12} & 0 & 0 & 0 \\ P_{12} & P_{11} & P_{12} & 0 & 0 & 0 \\ P_{12} & P_{12} & P_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & P_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P_{44} \end{bmatrix}$$

B 位错坐标系 $[1\bar{1}0], [112], [111]$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{2}(P_{11}+P_{12}) & \frac{1}{6}(P_{11}+5P_{12}) & \frac{1}{3}(P_{11}+2P_{12}) & \frac{\sqrt{2}}{6}(P_{11}-P_{12}) & 0 & 0 \\ +2P_{44}) & -2P_{44}) & -2P_{44}) & -2P_{44}) & & \\ \frac{1}{6}(P_{11}+5P_{12}) & \frac{1}{2}(P_{11}+P_{12}) & \frac{1}{3}(P_{11}+2P_{12}) & \frac{\sqrt{2}}{6}(P_{11}+P_{12}) & 0 & 0 \\ -2P_{44}) & +2P_{44}) & -2P_{44}) & +2P_{44}) & & \\ \frac{1}{3}(P_{11}+2P_{12}) & \frac{1}{3}(P_{11}+2P_{12}) & \frac{1}{3}(P_{11}+2P_{12}) & 0 & 0 & 0 \\ -2P_{44}) & -2P_{44}) & +4P_{44}) & & & \\ \frac{\sqrt{2}}{6}(P_{11}-P_{12}) & \frac{\sqrt{2}}{6}(-P_{11}+P_{12}) & 0 & \frac{1}{3}(P_{11}-P_{12}) & 0 & 0 \\ -2P_{44}) & +2P_{44}) & & +P_{44}) & & \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{1}{3}(P_{11}-P_{12}) & \frac{\sqrt{2}}{6}(P_{11}-P_{12}) \\ & & & & +P_{44}) & -2P_{44}) \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{2}}{6}(P_{11}-P_{12}) & \frac{1}{6}(P_{11}-P_{12}) \\ & & & & +2P_{44}) & +4P_{44}) \end{bmatrix}$$

参 考 文 献

- [1] 葛传珍、凌黎、王牧、牛钟明、闵乃本、冯端, 物理学报, 35(1986), 188.

- [2] Ge Chuan-zhen (葛传珍), Ming Nai-ben (闵乃本) and Feng Duan (冯端), *Phil. Mag.*, **A53**(1986), 285.
- [3] J. F. Nye, *Physical Properties of Crystals*, Oxford, (1957), p. 41.
- [4] D. J. Fathers and B. K. Tanner, *Phil. Mag.*, **27**(1973), 17; 794.
- [5] M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon, 6th (1980), p. 694.
- [6] LANDOLT-BÖRNSTEIN, *New Series*, Vol. 11, ed. K. H. Hellwege, *Elastic, Piezoelectric, Pyroelectric, Piezooptic, Electrooptic Constants and Nonlinear Dielectric Susceptibilities of Crystals*, Springer-Verlag, Berlin, (1979).
- [7] B. K. Tanner and D. J. Fathers, *Phil. Mag.*, **29**(1974) 1081.
- [8] J. W. Steeds, *Introduction to Anisotropic Elasticity Theory of Dislocations*, Oxford, (1973), p. 2.
- [9] 蒋民华, 晶体物理, 山东科学技术出版社, (1980), 106 页.

BIREFRINGENCE IMAGES OF END-ON SCREW DISLOCATIONS IN GGG CRYSTALS CONTAINING A LONG-RANGE PLANE STRAIN FIELD

GE CHUAN-ZHEN ZHANG JING FENG DUAN
(*Departments of Physics, Nanjing University*)

ABSTRACT

The expression for intensity distribution and computer simulated images of screw dislocations with Burgers vector $1/2\langle 111 \rangle$ viewed end-on in gernet crystals subjected to a long-range strain have been obtained by considering only the anisotropy of the photo-elastic property of the material. The computer-simulated images of end-on screw dislocations show twofold symmetry with a pair of dark and bright petals which result from the effect of a long-range plane strain field superimposed on screw dislocation. The computer-simulated images are in good agreement with the experimental images in GGG crystals.

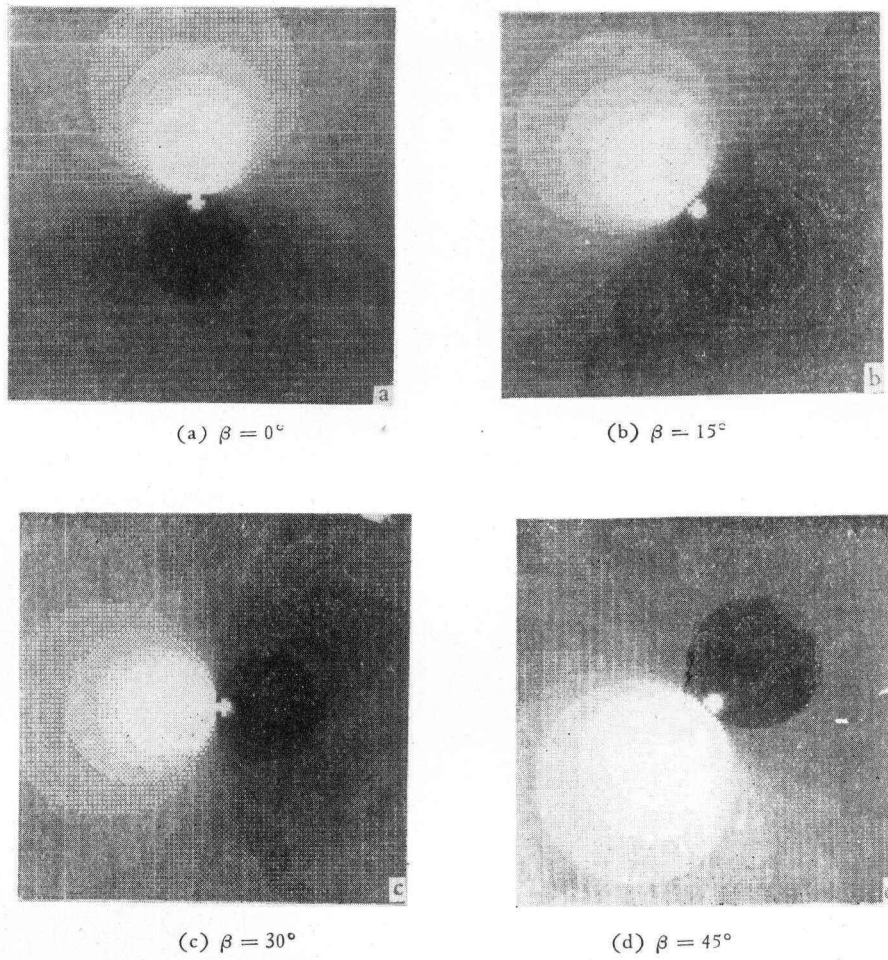


图1 存在长程应变场的 GGG 晶体中 $a/2[111]$ 螺型位错双折射像的计算机模拟像 (a)~(d) 为晶体中 $[1\bar{1}0]$ 与起偏器为不同夹角 β 时的模拟像, 选取 $u_0/b = 19.6\%$, $\Phi = 45^\circ$, 起偏器与水平方向一致

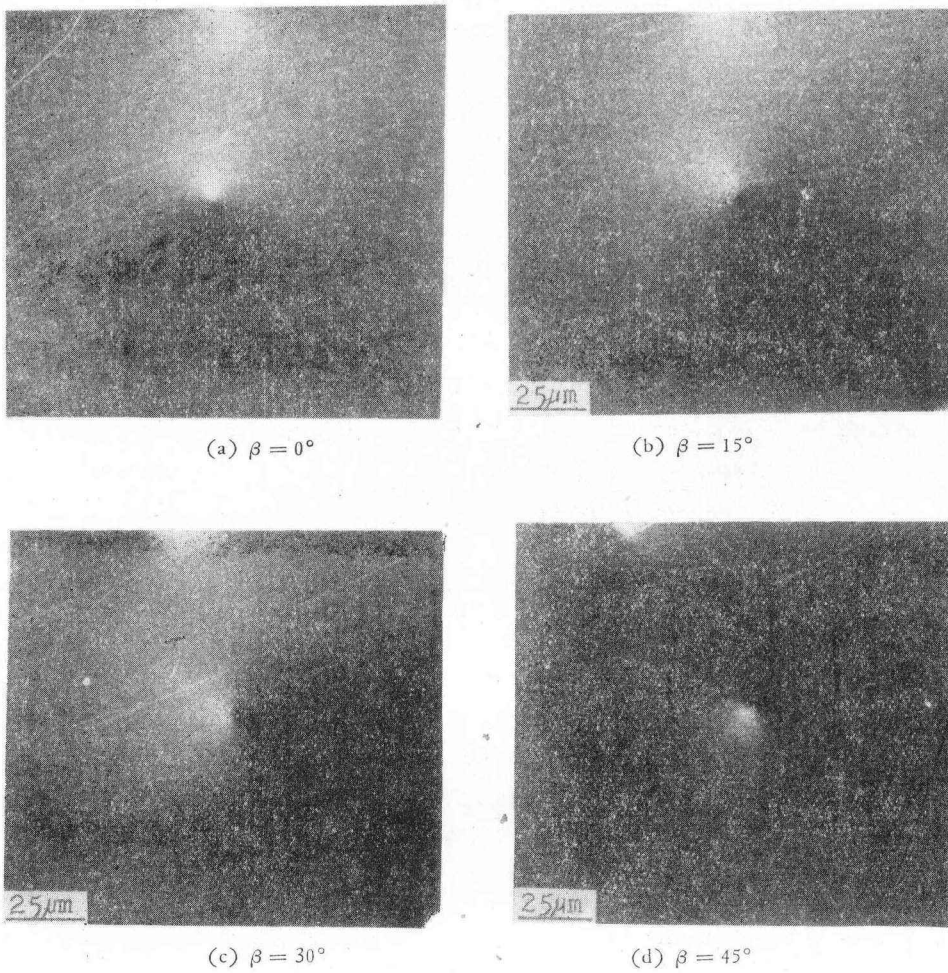


图2 GGG 晶片中 $a/2[111]$ 螺型位错的双折射像 (a)–(d) 为晶体中 $[1\bar{1}0]$ 相对于起偏器旋转不同角度后的双折射像，起偏器与水平方向一致