

六角片状包裹体双折射象与计算机模拟象

徐秀英 张杏奎 冯 端 吕 鹏

南京大学物理系固体物理研究所, 南京, 210008

1989 年 5 月 18 日收到

在钆镓石榴石 (GGG) 晶体中观察到六角片状大包裹体的应力双折射象, 对其应变场进行了分析, 并计算双折射象的反衬和作出相应的数值模拟象, 实验与理论计算结果符合得较好。

PACC: 7820F; 6170; 6170J; 4230

一、引 言

晶体中缺陷的存在必然给晶体的结构及物理化学等性质带来影响, 因此对缺陷的研究可更深入了解晶体性质, 而缺陷的直接观察中典型图象的建立是非常重要的, 它不仅对识别缺陷的种类, 而且对分析各种畸变形态的缺陷都是重要的依据, 同时借助于缺陷的图象还可间接得到如晶体方向, 宏观应变场, 晶体的光学品质等信息. 光双折射象或称应力双折射象自 50 年代问世以来, 首先证实单个位错的存在给位错理论的发展提供了实验证据, 70 年代随着激光晶体的发展 Matthews 等人^[1-4]对激光晶体的完整性和缺陷进行了系统的研究, Fathors, Tannek 等人^[5]为双折射象的计算建立了基础. 近年来 Paufler^[6-8]用红外激光对半导体器件的衬底的完整性进行了研究, 这些都说明光双折射象不仅能用于研究近完整性晶体中的缺陷, 同时也是一种良好的光损检测晶体品质的方法. 有关 $Gd_3Ga_5O_{12}$ 简称 GGG 晶体中的缺陷文献[9—11]已有报道. 本文对实验观察到的六角片状大包裹体的双折射象进行了分析, 并用计算机模拟象加以对比, 两者结果是一致的。

二、实验方法与结果

所用晶体是用提拉法生长的, 其生长轴为 [111], 从晶体中切取 (111) 面为观察面, 样品厚约为 1mm, 经机械及光学抛光成透明的薄片, 选用 Orthoplan-Pol 偏光显微镜, 采用透射法. 应变场的分析用 Brace-Köhler 补偿器, 其量程范围为 $\lambda/20$. 计算机模拟象是在 IBM-PC/XT 微型机及 M2024 型可挂针打印机上完成的. 在 GGG 晶体 (111) 面的样品中观察到六角形片状大包裹体其直径为 $625\mu\text{m}$, 厚度约 $48\mu\text{m}$, 而且平躺在 (111) 面内, 因此它的外形和双折射象均非常清晰. 这类包裹体一般认为是铍包裹体. 它是拉晶所用铍坩埚的沾污所致. 在正交偏光下可观察到两种类型的双折射象, 当旋转上、下偏

振镜 (A, P) 一圈, 在 4 个位置上可观察到如图 1(a) (见图版 I) 所示的双折射象, 在六角形包裹体周围是 4 叶全亮的花瓣具有 4 次对称性, 而偏离这些位置时, 则是具有 2 次对称性的黑白相间的 4 叶花瓣, 且黑的 2 叶其中心处有白的小叶如图 1(b) (见图版 I) 所示. 在旋转 A, P 时两种类型图象交替转换, 这可能是由于晶体内存在宏观应变场所引起的. 为了证实这点我们用 Brace-Köhler 补偿器对应变场进行分析, 将图 1(b) 的象 (它的晶体坐标 x, y 轴与图的边框一致, A, P 与 x, y 呈 45°) 在 45° 位插入补偿器 (补偿器的慢光方向与补偿器的边框呈 45°) 调节补偿器的测微螺旋, 当由图 1(b) 的象变为图 1(a) 象时, 读得 $\omega = 12.9^\circ$ 时, 补偿器的白慢光方向正好与 x 轴平行, 这正好说明在晶体的 x 轴方向存在一长程场 u_0 , 当补偿器补偿掉后就变为图 1(a) 的 4 叶全亮花样, 经计算 u_0 所产生的程差为 2.96mm , 且为张应力. 同理将图 1(a) 花样当晶体和 A, P 均转 45° 使被测的 2 叶在正交偏光下处于对角位, 插入补偿器, 调节补偿器当与补偿器慢光方向一致的 2 叶白的花瓣变黑时, 读得 $\omega = 15^\circ$, 计算得包裹体应变场的程差为 4.78nm 其符号与 u_0 相同也为张应力, 这正好说明沿长程场 u_0 的方向上包裹体应变场是加强的, 它使白的花瓣变大而形成黑白两对花瓣反衬的差异.

从上述实验证实图 1(a) 的花样 (4 叶全亮) 是当长程场不起作用 (或 $u_0 = 0$) 时包裹体双折射象. 图 1(b) 为存在长程场时的花样即黑白相间的 4 叶花样, 而且发现存在长程场的花样当旋转 A, P 时整个花样跟着转动, 但花样的基本形式不变.

三、理论解释

六角片状包裹体的应变场的求解是极其困难的, 但是圆柱状包裹体的应变场则有标准的解析解, 因此对于薄片样品中六角形片状包裹体后者不失为一个很好的近似解, 此时是一个平面应变问题, 其位移场的通解为

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (c_1 + c_2/r^2)\mathbf{r}, \quad (1)$$

式中 c_1, c_2 为待定常数; $\mathbf{r}$ 为以包裹体中心为原点的位置矢量. 如取边界条件 $u(\infty) = 0$, $u(r_0) = M/r_0$, 则 $c_1 = 0$, $c_2 = M$, 其中 r_0 为包裹体的半径, M 为包裹体和晶格失配的常数, 所以

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = (M/r^2)\mathbf{r} \quad r \geq r_0. \quad (2)$$

在直角坐标中的位移场为

$$u_x = Mx/r^2, \quad u_y = My/r^2, \quad u_z = 0. \quad (3)$$

其相应的应变场为

$$\begin{aligned} e_{xx} &= \frac{\partial u_x}{\partial x} = M/r^2 [1 - 2x^2/r^2], \\ e_{yy} &= \frac{\partial u_y}{\partial y} = M/r^2 [1 - 2y^2/r^2], \\ e_{xy} &= 1/2 \left(\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x} \right) = -2Mxy/r^4. \end{aligned} \quad (4)$$

当晶体内存在一长程场 $u_0 \mathbf{E}$ 且与晶体坐标 x 轴一致时, 则其应变分量为

$$E_{xx} = u_0, E_{yy} = 0, E_{xy} = 0. \quad (5)$$

因此对晶体存在长程场(平面应变场)的包裹体,当光沿 z 轴进行时可得到久期方程^[8]为

$$\begin{vmatrix} 1/n^2 - B_0 + b_1(e_{xx} + E_{xx}) + b_2\Delta & -b_1(e_{xy} + E_{xy}) \\ -b_1(e_{xy} + E_{xy}) & 1/n^2 - B_0 + b_1(e_{yy} + E_{yy}) + b_2\Delta \end{vmatrix} = 0, \quad (6)$$

式中 $\Delta = e_{xx} + e_{yy} + E_{xx} + E_{yy}$; B_0 为无应变时的逆介电张量; b_1, b_2 为光弹系数. 从(6)式可求得 $n_{\pm}$ 的解

$$\Delta n = n_+ - n_-, \quad \delta = (2\pi/\lambda)\Delta n l,$$

故 $\delta \propto \{[(e_{xx} + E_{xx}) - (e_{yy} + E_{yy})]^2 + 4(e_{xy} + E_{xy})^2\}^{1/2}, \quad (7)$

$$\theta = 1/2 \tan^{-1} \{2(e_{xy} + E_{xy}) / [(e_{xx} + E_{xx}) - (e_{yy} + E_{yy})]\}. \quad (8)$$

δ 为两正则基模之间的位相差, θ 为应力主轴与 y 轴之间的夹角, 光通过正交偏光后两基模的干涉强度为

$$I = \sin^2 \delta \sin^2(\alpha + \theta), \quad (9)$$

α 为分析镜与 x 轴间的夹角, 将(7), (8)式代入(9)式得

$$I = \{[(E_{yy} + e_{yy}) - (E_{xx} + e_{xx})] \sin 2\alpha + 2(e_{xy} + E_{xy}) \cos 2\alpha\}^2. \quad (10)$$

将(4), (5)式代入(10)式得包裹体的双折射象强度为

$$I = \{[(-2M/r^2) \cos 2\phi + u_0] \sin 2\alpha + (2M/r^2) \sin 2\phi \cos 2\alpha\}^2. \quad (11)$$

现在分三种特殊情况加以讨论.

1) $u_0 = 0$ 即当长程场为零时,

$$I = \{(2M/r^2) \sin 2(\phi - \alpha)\}^2. \quad (12)$$

它的等强度轮廓曲线是具有 4 次对称性的 4 叶全亮花瓣.

2) $u_0 \neq 0, \alpha = 0$ 时,

$$I = \{(2M/r^2) \sin 2\phi\}^2 \quad (13)$$

它与 1) 的情况一样, 也是 4 叶全亮花瓣. 因为当 $\alpha = 0$ 时, 即当 A, P 与 x, y 轴一致时, 长程场不起作用, 所以它的象与 1) 相同.

3) $\alpha = 45^\circ, u_0 \neq 0$ 时,

$$I = \{(-2M/r^2) \cos \phi + u_0\}^2. \quad (14)$$

由于 u_0 的存在且当其大小与包裹体应变场相近时, 必然导致花瓣反衬发生变化, 变为两黑两白相间的 4 叶花瓣, 长程场的作用与插入一程差板是相当的.

将上述计算结果用编辑程序作计算机数值模拟图, 根据实验结果, 选用 $M = 1, u_0 = 0.5$ 作不同 α 值时的模拟象如图 2(a)~(d) (见图版 I) 它和实验所得的双折射象图 3(a)~(d) (见图版 I) 是完全一致的. 图 3(a) 为当长程场不起作用时的象(4叶全亮). 图 3(b)~(d) 为长程场与 A, P 呈 $30^\circ, 45^\circ, 60^\circ$ 时的象. 它是黑白相间的 4 叶, 且随着 α 值的变化花样的基本型式不变, 但整个花样随着 α 的变化而跟着转动.

四、讨 论

实验与理论计算结果是一致的, 六角片状大包裹体的应力双折射象, 当长程场为零

($u_0 = 0$) 或不起作用时(即 $\alpha = 0$ 或 90° 长程场的方向与 A 或 P 一致)为 4 叶全亮花瓣组成的象,且具有 4 次对称性,当长程场与 A 或 P 之间的夹角 α 为 30° , 45° , 60° 时呈显两黑两白的 4 叶花瓣,具有 2 次对称性,且黑、白两对花瓣的大小有差异,在黑的花瓣中心处出现由黑色等倾线所组成的白色小叶。

长程场的作用从(14)式中可见,当长程场 u_0 的大小与包裹体应变场(它与 M 的大小有关)相差很大时,(14)式等号右边大括号中一项被另一项所淹没,而只有当长程应变场 u_0 与包裹体应变场大小相近时对反衬的影响最为明显,而且与 M 和 u_0 的符号有关,实验也证实这点。用补偿器测得由长程场 u_0 和包裹体应变场所引起的位相差分别为 2.96nm 和 4.78nm。两者相近且符号相同,因此双折射象反衬较佳。在作计算机模拟象时同样也发现 M 和 u_0 的大小对 II 型图象(图 1(b))中黑、白两对花瓣之间的大小有影响。根据实验结果选用 $M = 1$, $u_0 = 0.5$ 时,计算机模拟象与双折射象符合较好。

博士点基金资助的课题。

- [1] J. W. Matthews, E. Klokholm, V. Sadagopan, T. S. Plaskett and E. Mendel, *Acta. Met.*, 21(1973), 203.
- [2] J. W. Matthews, T. S. Plaskett and S. E. Blum, *J. Cryst. Growth*, 42(1977), 621.
- [3] J. W. Matthews and T. S. Plaskett, *Phil. Mag.*, 33(1976), 73.
- [4] J. W. Matthews and T. S. Plaskett, *J. Mat. Sci.*, 13(1978), 2029.
- [5] D. J. Fathers and B. K. Tanner, *Phil. Mag.*, 27(1973), 17.
ibid., 28(1973), 49.
- [6] P. Paufler and K. Loschke, *Phil. Mag.*, 47(1983), 79.
- [7] H. Booyens and J. H. Basson, *J. Appl. Phys.*, 51(1980), 4368.
- [8] B. K. Tanner and D. J. Fathers, *Phil. Mag.*, 29(1974), 1081.
- [9] S. Y. Shu, Z. Z. Kuo, D. Feng, *J. de. Phys.*, 41(1980), c6186.
- [10] C. Z. Ge, L. Ling, M. Wang and D. Feng, *Acta. Phys. Sin.*, 35(1986), 188.
- [11] C. Z. Ge, X. Y. Xu and D. Feng, *Acta, Phys. Sin.*, 30(1981), 218.

BIREFRINGENCE IMAGE OF A LARGE HEXAGONAL LAMELLAR INCLUSION AND COMPUTER SIMULATION

XU XIU-YING ZHANG XING-KUI FENG DUAN LI PENG

Department of Physics and Institute of Solid State Physics, Nanjing University, Nanjing, 210008

(Received 18 May 1989)

ABSTRACT

Birefringence image of a large hexagonal lamellar inclusion have been observed in GGG single crystal. The strain field of inclusion and long-rang strain field are analyzed with Brace-Kohler compensator. The theoretical calculation and computer simulation are in agreement with the result of experiment.

PACC: 7820F; 6170; 6170J; 4230