

四方晶系 SBN 晶体中位错光双折射像的理论计算和实验观察

徐秀英 张杏奎

(南京大学物理系固体物理研究所)

提 要

本文计算了铌酸锶钡(SBN)晶体中沿光轴的位错双折射像的反衬, 计算中考虑了光弹系数的各向异性, 结果表明与各向同性计算相比刃位错双折射像中的花瓣有伸长的趋势, 螺位错无反衬, 并与实验结果作了比较。

关键词: 双折射像。

一、引 言

位错光双折射像的理论计算最初由 Bullough, R. (1958)^[1] 得出, Fathers-Tanner (1973)^[2,3] 用更严格的一般方法进行了计算, 随着实验工作的进展发现实际晶体中不可避免地存在宏观应力场, 因此 Tanner-Fathers(1974)^[4] 对具有平面应变场的位错双折射像进行了计算。Boud and Audrus^[5], Indenbom and Tomilovskii^[6], Matthews^[7~9] 等先后在硅晶体及镓钽石榴石晶体中获得了位错双折射像。我们在激光晶体 $Y_3Al_5O_{12}$ ^[10]及旋光晶体 $Bi_{12}GeO_{20}$ ^[11]中成功地观察到位错双折射像并和理论计算相符合, 但这些工作均偏重于立方晶系的晶体而对低对称性晶体中位错双折射像则缺少报道, 而要研究低对称性晶体中位错双折射像必需考虑的问题是实验上要抵消掉自然双折射的干扰, 否则是观察不到像的。同时在双折射像的解释方面反衬的计算中必需考虑各向异性。本文采用沿光轴观察避开自然双折射同时, 在反衬的计算中考虑了光弹系数的各向异性。

二、理论计算

Fathers, Tanner^[2,3] 等人对立方晶系晶体如 GGG 中位错双折射像的计算将位错应变场和光弹系数均作各向同性近似, 但对低对称性晶体必需考虑各向异性, 本文作为一级近似考虑了光弹系数的各向异性, 而将位错应变场仍作各向同性近似来进行计算。根据 Fathers-Tanner 的理论, 产生光弹效应的缺陷应变场可通过其对逆介电张量 B 的影响来表示, 并采用电位移矢量 D 来进行计算比较方便, 它和电场 E 及电位移矢量 D 的关系为

$$\epsilon_0 E = BD, \quad (1)$$

ϵ_0 为真空中的介电常数。因此将位错应变场结合到逆介电张量中去则 \mathbf{B} 为^[12]

$$\mathbf{B} = \mathbf{B}_0 + \mathbf{P}\mathbf{e}, \quad (2)$$

\mathbf{P} 为光弹张量, \mathbf{e} 为应变张量, B_0 为真空中介电透射率, $B_0 = 1/\epsilon_0$ 。

对 SBN 晶体 $4mm$ 点群其光弹张量分量为^[13]

$$\mathbf{P} = \begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & P_{13} & 0 & 0 & 0 \\ P_{12} & P_{11} & P_{13} & 0 & 0 & 0 \\ P_{31} & P_{31} & P_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & P_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & P_{66} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

1. 刃型位错

当刃型位错线平行于 z 轴即晶体的四次对称轴, 位错的 \mathbf{b} 矢量平行于 x_1 轴, 刃位错的应变分量为

$$\mathbf{e} = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{12} & 0 \\ e_{21} & e_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$\left. \begin{aligned} e_{11} &= -\frac{Ax_2}{r^4} [x_1^2(3-2\gamma) + x_2^2(1-2\gamma)], \\ e_{22} &= \frac{Ax_2}{r^4} [x_1^2(1+2\gamma) - x_2^2(1-2\gamma)], \\ e_{12} &= \frac{2Ax_1(x_1^2 - x_2^2)}{r^4}, \\ A &= \frac{b}{4\pi(1-\nu)}, \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

将(3)、(4)、(5)式代入(2)式则得

$$\begin{bmatrix} B_{11}^0 + P_{11}e_{11} + P_{12}e_{22} & P_{66}e_{12} & 0 \\ 0 & B_{11}^0 + P_{12}e_{11} + P_{11}e_{22} & 0 \\ 0 & 0 & B_{33}^0 + P_{31}e_{11} + P_{31}e_{22} \end{bmatrix}, \quad (6)$$

当光沿 z 轴传播时其久期方程为[2, 3]

$$\begin{bmatrix} 1/n^2 - (B_{11}^0 + P_{11}e_{11} + P_{12}e_{22}) & -P_{66}e_{12} \\ 0 & 1/n^2 - (B_{11}^0 + P_{12}e_{11} + P_{11}e_{22}) \end{bmatrix} = 0, \quad (7)$$

由(7)式可解得 n_- 及 n_+

$$n_{\pm} = \left[\frac{P+Q}{2} \pm \left\{ \left(\frac{P-Q}{2} \right)^2 + R^2 \right\}^{\frac{1}{2}} \right]^{-\frac{1}{2}}, \quad (8)$$

$$P = B_{11}^0 + P_{11}e_{11} + P_{12}e_{22},$$

$$Q = B_{11}^0 + P_{12}e_{11} + P_{11}e_{22},$$

$$R = -P_{66}e_{12},$$

$$\frac{1}{n_-^2} - \frac{1}{n_+^2} = -2 \left\{ \frac{1}{4} \left(\frac{-4Ax_2x_1^2}{r^4} \right)^2 (P_{11} - P_{12})^2 + \left(\frac{-2Ax_1(x_1^2 - x_2^2)}{r^4} \right)^2 P_{66}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (9)$$

$$\Delta n = (n_+ - n_-) = \frac{n^3}{2} \left(\frac{1}{n_-^2} - \frac{1}{n_+^2} \right),$$

$$\Delta n = -n^3 \left\{ \left(\frac{-4Ax_2x_1^2}{r^4} \right)^2 \left(\frac{P_{11} - P_{12}}{2} \right)^2 + \left(\frac{-2Ax_1(x_1^2 - x_2^2)}{r^4} \right)^2 P_{66}^2 \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (10)$$

设 $P_{66} = \frac{1}{2}(P_{11} - P_{12}) + s$ s 为各向异性值

$\because s \ll 1$ 略去 s^2 项则

$$\Delta n = -\frac{n^3 Ax_1 (P_{11} - P_{12})}{r^3} \left\{ 1 + \frac{4s}{P_{11} - P_{12}} \left[\frac{x_1^2 - x_2^2}{r^2} \right]^2 \right\}^{\frac{1}{2}}, \quad (11)$$

若样品厚度为 l , 则二基模的位相差 $\delta = \frac{\pi}{\lambda} \Delta n l$, 二基模与 y 轴之间的夹角 θ 为

$$\tan 2\theta = \frac{2B_{12}}{B_{11} - B_{22}} = \left(1 + \frac{2s}{P_{11} - P_{12}} \right) \frac{x_2^2 - x_1^2}{2x_2x_1}, \quad (12)$$

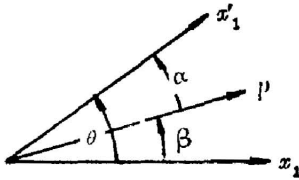


Fig. 1 Angles between x_1 , x_1' and P

设起偏镜与 x_1 轴之间夹角为 β , 应力主轴与 P (起偏镜) 之间夹角为 α , 应力主轴 x_1' 与 x_1 之间的夹角为 θ , 它们之间的关系见图 1, 则

$$\alpha = \theta - \beta, \quad (13)$$

在正交偏光下干涉的光强公式为 $I = \sin^2 2\alpha \sin^2 \delta$, 当 δ 很小时

$$I = \delta^2 \sin^2 2\alpha = \left[\frac{A\pi n^3 l (P_{11} - P_{12}) x_1}{\lambda r^3} \right]^2 \left\{ 1 + \frac{4s}{P_{11} - P_{12}} \left[\frac{x_1^2 - x_2^2}{r^2} \right]^2 \right\} \sin^2 2(\theta - \beta) \quad (14)$$

转换成极坐标 (r, ψ)

$$\tan 2\theta = - \left(1 + \frac{2s}{P_{11} - P_{12}} \right) \cot 2\psi, \quad (15)$$

当 $s \ll (P_{11} - P_{12})$ 时, $\tan 2\theta \doteq -\cot 2\psi$

$$\therefore 2\theta = - \left(2\psi + \frac{\pi}{2} \right). \quad (16)$$

$$I = \frac{B_1^2}{r^2} \cos^2 \psi \cos^2 2(\psi - \beta) \left[1 + \frac{4s}{P_{11} - P_{12}} \cos^2 2\psi \right], \quad (17)$$

$$B_1 = \frac{A\pi n^3 l (P_{11} - P_{12})}{\lambda},$$

其强度轮廓曲线为

$$r^2 = \frac{B_1^2}{I} \cos^2 \psi \cos^2 2(\psi - \beta) \left[1 + \frac{4s}{P_{11} - P_{12}} \cos^2 2\psi \right], \quad (18)$$

很明显光强是由二项组成, 第一项即为各向同性介质中位错的衬度, 第二项是由各向异性值 s 所决定。当 $s=0$ 只有第一项即为各向同性介质中位错衬度。将不同 s 值的位错光双折射像用计算机作数值模拟图*其结果见图 2, 3。图 2(a) 为 $\beta=0, s=0$ 时的图样即当位错的 b 矢量与 A 或 P 一致时, 各向异性值为零时, 即为各向同性介质中位错像, 它为六叶花

* 邱燕,《应用科学学报》,待发表。

瓣,其中沿 b 方向的二叶最强。图 2(b)、(c)、(d) 为当 $\beta=0$, $4\varepsilon/(P_{11}-P_{12})$ 分别为 0.1, 0.5, 1 时的图样, 很明显随着各向异性值 ε 的增大, 花瓣的长与宽之比增大, 整个花样沿 b 方向拉长。图 3 为 $\beta=45^\circ$ 时, 当 ε 值增加时的图样, 其中 (a) 为 $\varepsilon=0$ 时图样, 也即为各向同性介质中位错像, 它为四叶花瓣, b 矢量方向与 A 或 P 呈 45° 。当 ε 值增加时, 同样花样也沿 b 矢量方向拉长如图 3(b)、(c)、(d) 所示, 即沿图中 x_1 方向有拉长趋势。

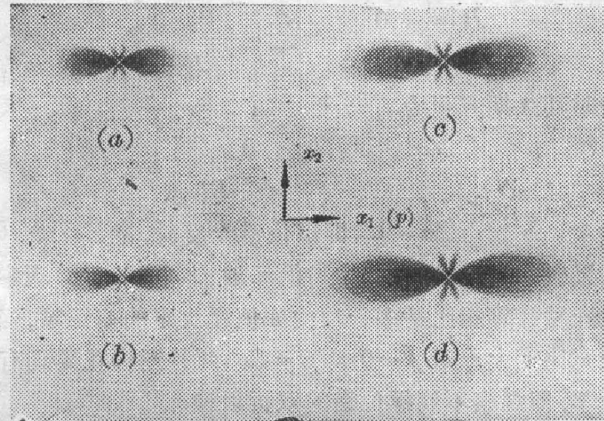


Fig. 2 Computer simulation of dislocation birefringence image with various values of anisotropy ε when $\beta=0$
(a) $\varepsilon=0$; (b), (c), (d) $4\varepsilon/(P_{11}-P_{12})=0.1, 0.5, 1$

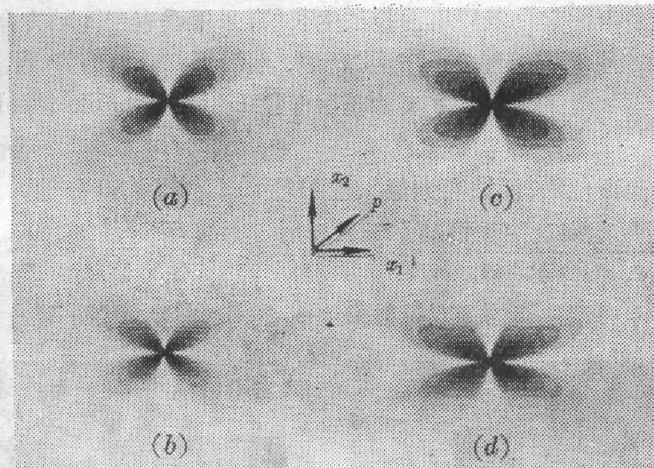


Fig. 3 Computer simulation of dislocation birefringence image with various values of anisotropy ε when $\beta=45^\circ$
(a) $\varepsilon=0$; (b), (c), (d) $4\varepsilon/(P_{11}-P_{12})=0.1, 0.5, 1$

2. 螺位错

当光沿 z 轴即晶体的光轴传播时, 可能观察到纯螺位错, 其 $b=a$ 。螺位错的应变分量为

$$\mathbf{e} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & e_{13} \\ 0 & 0 & e_{23} \\ e_{31} & e_{32} & 0 \end{bmatrix}; \quad (19)$$

$$\begin{aligned} e_{13} = e_{31} &= -\frac{\mu b}{2\pi} \frac{y}{x^2 + y^2}, \\ e_{23} = e_{32} &= \frac{\mu b}{2\pi} \frac{x}{x^2 + y^2}, \end{aligned} \quad (20)$$

将(3)、(19)式代入(2)式则得

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} B_{11}^0 & 0 & P_{44}e_{23} \\ 0 & B_{11}^0 & P_{44}e_{13} \\ P_{44}e_{23} & P_{44}e_{13} & B_{11}^0 \end{bmatrix}, \quad (21)$$

当光沿 z 轴方向传播时其久期方程为

$$\begin{bmatrix} 1/n^2 - B_{11}^0 & 0 \\ 0 & 1/n^2 - B_{11}^0 \end{bmatrix} = 0, \quad (22)$$

$\Delta n = 0$ 即螺位错无反衬。

因此理论计算结果表明室温 SBN 晶体当沿 z 轴(即晶体光轴)观察时,刃型位错的等强轮廓曲线与各向同性介质计算相比是多一项由 ε 值所决定的修正项,当 ε 值增大时,等强度轮廓曲线它的花瓣长宽比变大,对 $\beta=0$ 及 $\beta=45^\circ$ 两种图样花瓣均有沿 b 方向拉长的趋向。而螺位错反衬为零,即观察不到螺位错的双折射像。

三、实验结果

实验所用样品是由北京化工厂用提拉法生长的,采用垂直于 z 轴方向切片,样品厚度为 2mm 左右,先用氧化铝粉 305#, 306# 逐次研磨,然后用钻石研磨膏 $W_1, W_{0.5}$ 抛光至透明的光学薄片即可在显微镜下观察。本实验是用西德 Leitz Orthoplan-pol 偏光显微镜透射法进行观察。

用化学浸蚀法验证位错,浸蚀液为氢氟酸 HF 40%, 室温, 30 分钟。

结合 X 射线劳厄定向确定位错的 b 矢量,用自制的 SBN 晶体 (001) 面晶面极图和 $\langle 001 \rangle$ 晶向极图定向。

实验观察到单个刃型位错的光双折射像如图 4(a)、(b) 所示,图 4(a) 为 $\beta=0$ 时(即位错

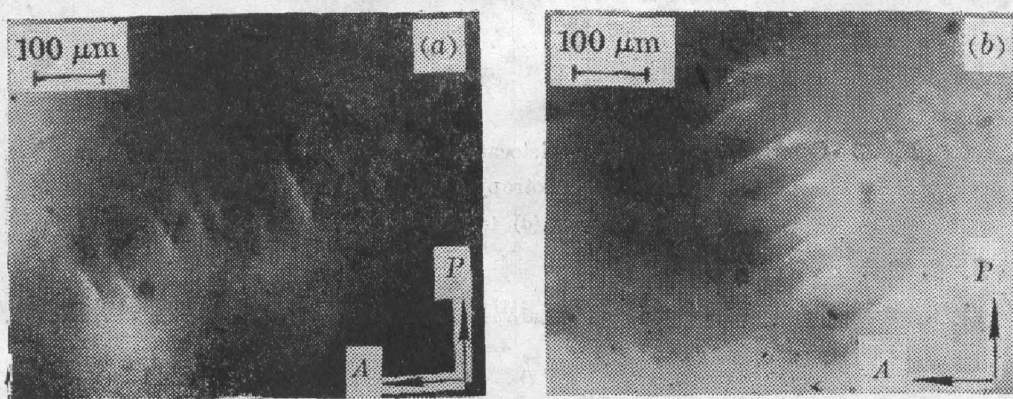


Fig. 4 Birefringence image of single edge dislocation

(a) $\beta=0$; (b) $\beta=45^\circ$

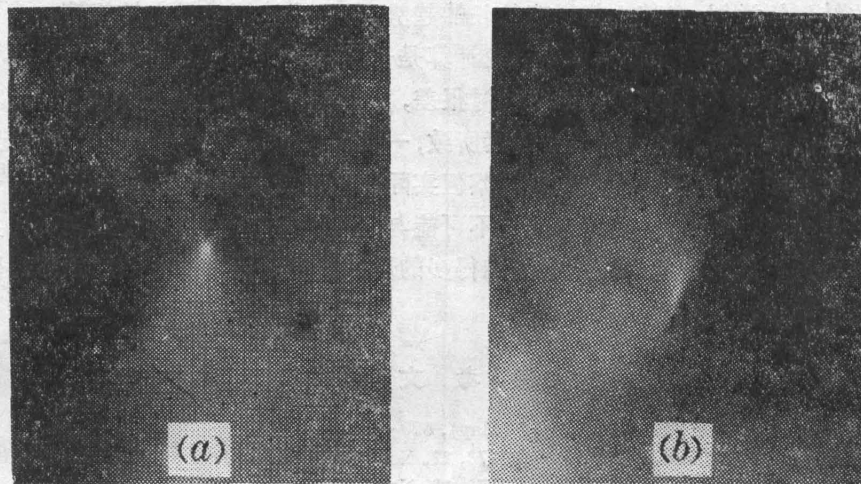


Fig. 5 Birefringence image of edge dislocation

(a) $\beta=0$; (b) $\beta=45$

b 矢量与 A 或 P 平行)的花样,它为六叶花瓣,但一般只有沿 b 矢量方向的最大二叶能显示。图中为沿 P 方向的花瓣最强,而且这二叶是一白一黑的。图 4(b) 为 $\beta=45^\circ$ 时的花样,它是四叶花瓣,分布在 b 矢量方向(图中与 A, P 呈 45°)的两侧,二叶白的在一侧,二叶黑的在另一侧,花瓣有黑白之分,这是由长程场所致^[4]。仔细观察图 4(a)中沿 P 方向黑色的花瓣估计其长宽之比是大于当 $\epsilon=0$ 时的理论值的,(理论值约为 2.2)整个花样有拉长的趋势,而且和 YAG, BGO^[10, 11] 等晶体中的位错双折射像相比它是既小又细。图 5(a)、(b)为 α -石英晶体中的刃位错像。根据理论计算*在 α -石英中沿光轴观察到的刃位错和各向同性一样。图 4 可与它作较为直观的比较,但总的说由于花样太小只能作为定性的结果。

为进一步验证位错,用化学浸蚀法将样品浸蚀后位错露头点的蚀斑如图 6 所示,它和位错双折射像是一一对应的,位错蚀斑呈八角形,见图 6 右下角。

结合 X 射线劳厄定向确定位错的 b 矢量为 $[1\bar{1}0]$ 。实验中未观察到螺位错像,这和理论预示是一致的。

四、结 论

(a) 沿光轴方向观察到 SBN 晶体中刃位错双折射像,从等强度轮廓曲线来看与各向同

* 徐秀英等,《物理学报》,待发表。

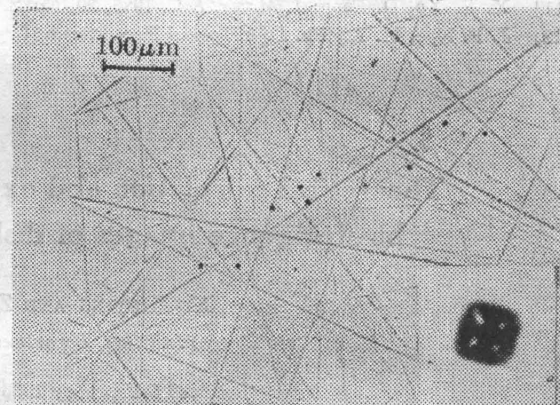


Fig. 6 Etch pits of dislocation corresponding to Fig. 4

性介质中的结果相类似,但整个花样有拉长的趋势,与理论计算结果定性相符。

(b) 实验中未观察到螺位错像和理论计算是一致的。

由于 SBN 晶体中位错双折射像的反衬很差,因此照相及精细的观察较困难,花样小也影响了各向异性的显示。这是有两个因素所致,一是晶体的光弹系数等常数所决定的,另外是自然双折射的影响,虽然采用沿光轴观察但实际上光传播方向和光轴不可能严格一致,因此背景场不是全黑。同时,位错的走向也不可能与光传播方向一致,这也是在各向异性晶体中观察缺陷双折射像比在各向同性中困难得多的原因所在。但对光弹效应强的晶体其各向异性必然会有增强。

参 考 文 献

- [1] R. Bullough; *Phys. Rev.*, 1958, **110**, No. 3 (May), 620~623.
- [2] D. J. Fathers, B. K. Tanner; *Phil. Mag.*, 1973, **27**, No. 1 (Jan), 17~34.
- [3] D. J. Fathers, B. K. Tanner; *Phil. Mag.*, 1973, **28**, No. 4 (Oct), 749~770.
- [4] B. K. Tanner, D. J. Fathers; *Phil. Mag.*, 1974, **29**, No. 5 (May), 1081~1094.
- [5] W. L. Bond, J. Andur; *Phys. Rev.*, 1956, **101**, No. 3 (Feb), 1211.
- [6] V. L. Indenbom, G. E. Tomilovskii; *Soviet. Phys. Crystallogr.*, 1957, **2**, No. 1 (Jan), 183.
- [7] J. W. Matthews, E. Klokholm *et al.*; *Acta. Met.*, 1973, **21**, No. 3 (Mar), 203~211.
- [8] J. W. Matthews, T. S. Plaskett *et al.*; *J. Crystal Growth.*, 1977, **42** (Dec), 621~624.
- [9] J. W. Matthews, T. S. Plaskett; *Phil. Mag.*, 1976, **33**, No. 1 (Jan), 73~85.
- [10] S. Y. Shu, Z. Z. Kuo *et al.*; *J. De. Phys.*, 1980, **41**, No. 7 (Jan), C6186~189.
- [11] X. Y. Xu, D. Feng; *J. Mater. Sci.*, 1985, **20**, No. 2 (Feb), 612~619.
- [12] J. F. Nye, M. A., Ph. D; *Physical Properties of Crystals*, (Clarendon Press, Oxford, 1957), 235~259.

Theoretical calculation and experimental observation of birefringence images of dislocation in SBN crystals

XU XIUYING AND ZHANG XINGKUI

(Solid State Physics Institute, Department of Physics, Nanjing University)

(Received 5 February 1986; revised 2 May 1986)

Abstract

In this paper, considering the photo-elastic anisotropy, we calculated the contrast of birefringence topography of dislocation in SBN crystals along the optical axis.

It is shown that the petals of edge dislocation image for anisotropic crystals are longer than that for isotropic crystals. The images for screw dislocation have no contrast. These results have been compared with experiments.

Key Words: birefringence image.