

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ
ИНСТИТУТ КРИСТАЛЛОГРАФИИ им. А.В.ШУБНИКОВА

На правах рукописи

УДК 548.0 : 535.5

УЛУХАНОВ
ИБРОХИМ ТУХТАХУЖАЕВИЧ

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИЙ МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ
АНИЗОТРОПНЫХ ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ
КРИСТАЛЛОВ

Специальность 01.04.07. - физика твердого тела

А в т о р е ф е р а т
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва 1991

Отпечатано в ИКАНе

Подписано в печать 11.1.1991.

Формат 60 x 90 1/16 Печ.л. 1

Заказ 38 Тираж 100.

Работа выполнена в ордена Трудового Красного Знамени
Институте кристаллографии им. А.В.Шубникова АН СССР

Научный руководитель - доктор физико-математических наук
КОНСТАНТИНОВА А.Ф.

Официальные оппоненты - доктор физико-математических наук
ЛЮБИМОВ В.Н.

кандидат физико-математических наук
ИВАНОВ Н.Р.

Ведущая организация - Институт физики АН БССР, г. Минск

Защита диссертации состоится " " 1991 года
в _____ мин. на заседании специализированного
совета Д.002.58.01 при Институте кристаллографии им. А.В.Шуб-
никова АН СССР по адресу: Москва П17333, Ленинский проспект,
59, Институт кристаллографии АН СССР.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института
кристаллографии АН СССР.

Автореферат разослан " " _____ 1991 года.

Ученый секретарь специализированного
совета Д.002.58.01

кандидат физико-математических наук
В.М.Каневский

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность темы. Оптические методы уже давно используются для исследования различных свойств веществ. Премущество оптических методов заключается в том, что они всегда дают богатую информацию о природе химической связи и позволяют с единых позиций изучить строение и состав веществ в разных агрегатных состояниях. Большинство свойств кристаллов тесно связано между собой, поскольку они определяются их атомной и реальной структурой и свойствами образующих химических элементов. Путь к эффективному использованию того или иного кристалла открывается только благодаря подробному знанию его свойств, в первую очередь оптических. Поэтому существует много методов определения оптических параметров кристаллов - показателей преломления, коэффициентов поглощения, параметров, характеризующих оптическую активность. В кристаллах важными параметрами, характеризующими оптическую анизотропию, являются: дупреломление, дихроизм и эллиптичность собственных волн. Разработанные в настоящее время методы определения оптических параметров кристаллов не дают возможности измерять анизотропные параметры одновременно, так как они определяются по отдельности, на разных приборах, что крайне неудобно. Кроме того, некоторые методы требуют от исследователя огромных усилий при расчете этих параметров из измерений. Возросшие потребности науки и техники требуют развития новых эффективных методов измерения анизотропных оптических параметров кристаллов, что является актуальной задачей.

Целью настоящей работы является разработка нового метода одновременного определения оптических анизотропных параметров кристаллов, создание установки, позволяющей проводить измерения и исследование ряда кристаллов предложенным методом.

Для достижения этой цели были поставлены следующие основные задачи:

- получить соотношения, позволяющие вычислять эллиптичность собственных волн, дупреломление и дихроизм из измерений интенсивности света, прошедшего через пластинку, расположенную между произвольно ориентированными поляризаторами;
- создать установку на основе предложенного метода, позволяющую в автоматическом режиме проводить все необходимые измерения;
- решить задачу определения дупреломления и дихроизма в кристаллах с учетом их неоднородности;

- измерить параметры оптической активности кристаллов кварца с примесью железа;
- исследовать ряд кристаллов предложенным методом.

Научная новизна полученных в диссертации результатов заключается в следующем:

1. На основании анализа интенсивности света, прошедшего через систему поляризатор - кристалл - анализатор, разработан метод исследования оптических свойств поглощающих гиротропных кристаллов, позволяющий одновременно определять двуупреомление, дихроизм, эллиптичность собственных волн в кристалле, компоненты псевдотензора гирации и ориентацию оптической оси кристалла.

2. Получены аналитические соотношения для определения оптических параметров кристаллов с учетом их неоднородности и проведено исследование двуупреомления и дихроизма кристаллов алмаза. При исследовании χ -облученных деформированных кристаллов Δn обнаружены двуупреомление и дихроизм при $\lambda = 0,45$ мкм.

3. Показана возможность определения эллиптичности собственных волн, двуупреомления, дихроизма, скалярного параметра гирации в оптически активных кристаллах и выделена компонента псевдотензора гирации g_{11} в кристаллах кварца.

4. Проведено измерение двуупреомления и дихроизма в кристаллах фторидов $M_{0,5-x}R_{0,5+x}F_{2+2x}$ ($R = Y, Dy, Ho, Er, Tm, Yb$) с R_{33} в области от 0,4 до 0,75 мкм. С помощью метода аддитивности молекулярных рефракций оценены показатели преломления новых кристаллов фторидов, исходя из химической формулы кристалла и его плотности.

5. Обнаружены двуупреомление и дихроизм в кристаллах фторидов $\lambda r O_2 - Y_2 O_3$, легированных различными примесями. Установлена аномалия различных оптических свойств кристаллов с примесью (0,1 вес.%) по сравнению с кристаллами с другими примесями.

Обнаружен резкий спад по величине двуупреомления при повышении температуры в кристаллах фторидов $\lambda r O_2 - Y_2 O_3$.

Практическая значимость работы. В работе предложен метод одновременного определения анизотропных оптических параметров кристаллов и создана установка на основе спектрометра КСВУ, позволяющая проводить в автоматическом режиме все необходимые измерения.

На защиту выносятся следующие основные положения:
 - спектрофотометрический метод одновременного определения двуупреомления, дихроизма, их дисперсий, ориентации оптической оси в кристаллах; эллиптичностей собственных волн и скалярного параметра гирации;

- способ реализации метода определения параметров оптической анизотропии кристаллов на основе спектрофотометра;
- соотношения для определения двуупреомления и дихроизма в кристаллах с учетом неоднородности;
- экспериментальные данные, полученные с помощью предложенного метода, оптических параметров ряда двуупреомляющих, поглощающих, неоднородных и оптически активных кристаллов.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на Всесоюзной Федоровской научной сессии (Ленинград, 1987, 1988, 1989 гг.), на семинаре "Оптика анизотропных сред" (ИКАН СССР, Москва, 1987, 1990 гг.), на Всесоюзном семинаре "Новые поляризационные методы и приборы для исследования напряженно-деформированного состояния, анализа состава и молекулярной структуры вещества (Дом оптики, Москва, 1988 г.), на седьмой Всесоюзной конференции по радиационной физике и химии органических материалов (Рига, 1989 г.), на II республиканской конференции по физике твердого тела (Ош, Кирг. ССР, 1989 г.), на IX Всесоюзном симпозиуме по спектроскопии кристаллов, активированных ионами редкоземельных и переходных металлов (Ленинград, 1990 г.), на XII Европейской кристаллографической конференции (Москва, 1989 г.) на III конференции научно-учебного центра "Применение физико-химических методов исследования в науке и технике (Москва, Университет Дружбы народов им. П.Лумумбы, 1990 г.), на I республиканской конференции молодых ученых и специалистов по физике (Фрунзе, 1990 г.) на конкурсе научных работ (ИКАН СССР, 1990 г.).

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, четырех глав, выводов, заключения, приложения и списка цитированной литературы. Объем диссертации составляет 130 страниц текста, включая 31 рисунок, 3 таблицы. Список литературы содержит 116 наименований.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обосновывается актуальность темы, сформулирована цель работы и основные положения, выносимые на защиту, показаны новые научные результаты и практическая значимость работы, приведено краткое содержание работы по главам.

В первой главе дан краткий обзор работ по различным методам определения двуупреомления и дихроизма в кристаллах. Основное внимание уделено возможности определения двуупреомления в кристаллах с помощью спектрофотометра. В этом случае образец находится в диагональном положении относительно скрещенных или параллельных поля-

ризатора и анализатора и при изменении длины волны определяется порядок интерференции и соответственно затем вычисляется дупреломление. Нами предлагается новый метод определения не только дупреломления, но и дихроизма кристаллов также с помощью спектрофотометра. Метод основан на измерении зависимости интенсивности J прошедшего света от угла поворота α пластины, расположенной между произвольно ориентированными поляризатором и анализатором. Для такой системы выражение для интенсивности $J(\alpha)$ можно представить в виде:

$$J = J_0 \frac{e^{\delta}}{4} (a + b_1 \cos 2\alpha + b_2 \sin 2\alpha + c_1 \cos 4\alpha + c_2 \sin 4\alpha), \quad (I)$$

где $a = c_1 \delta (2 + \cos 2\delta) + \cos 2\delta \cos \Delta$, $b_1^2 + b_2^2 = \delta^2$, $c_1^2 + c_2^2 = c^2$,
 $b_1 = 2.3 \delta \delta (1 + \cos 2\delta)$, $c_1 = (c \delta \delta - \cos \Delta) \cos 2\delta$,
 $b_2 = 2.3 \delta \delta \sin 2\delta$, $c_2 = (c \delta \delta - \cos \Delta) \sin 2\delta$,
 $\theta = (2.5 d / \lambda) (\alpha_2 + \alpha_1)$, $\delta = (2.5 d / \lambda) (\alpha_2 - \alpha_1)$,

$\Delta = (2.5 d / \lambda) (n_2 - n_1)$, $M_{1,2} = n_{1,2} + i \alpha_{1,2}$ - комплексные показатели преломления кристалла, $(n_2 - n_1)$ - дупреломление, $(\alpha_2 - \alpha_1)$ - линейный дихроизм, δ - угол между главными направлениями колебаний поляризатора и анализатора; a , b_1 , b_2 , c_1 , c_2 - коэффициенты Фурье функции $J(\alpha)$. На рис. I (а, в) показаны зависимости $J(\alpha)$ для нескольких значений Δ и δ для случаев, когда поляризаторы скрещены J^1 ($\delta = 90^\circ$) и параллельны J'' ($\delta = 0$). Из рис. I видно, что в прозрачных кристаллах период функции $J(\alpha)$ равен 90° , т.е. $J_1'' = J_3'' = J''_{max}$. В поглощающих кристаллах экстремальные значения J_1'' и J_3'' не равны между собой (рис. I, в), именно их различие и несет информацию о величине дихроизма, а период функции $J''(\alpha)$ становится равным 180° . Кроме того, можно заметить, что при значениях $\Delta < 90^\circ$ зависимости $J^1(\alpha)$ и $J''(\alpha)$ не пересекаются; если $\Delta > 90^\circ$, тогда $J^1(\alpha)$ и $J''(\alpha)$ пересекаются друг с другом, в то время как при $\Delta = 90^\circ$ $J^1(\alpha)$ и $J''(\alpha)$ касаются друг друга.

Из формулы (I), из отношения величин b/α и c/α получены формулы для вычисления $\cos \Delta$ и e^{δ} (при этом важно, что не нужно учитывать общее поглощение кристалла, связанное с членом $e^{-\delta}$).

$$\cos \Delta = \frac{a - c(2 + \cos 2\delta)}{\sqrt{(a + c \cos 2\delta)^2 - b^2 \cos^2 \delta}}, \quad e^{\delta} = \frac{a + b \cos \delta + c \cos 2\delta}{a - b \cos \delta + c \cos 2\delta} \cdot (2)$$

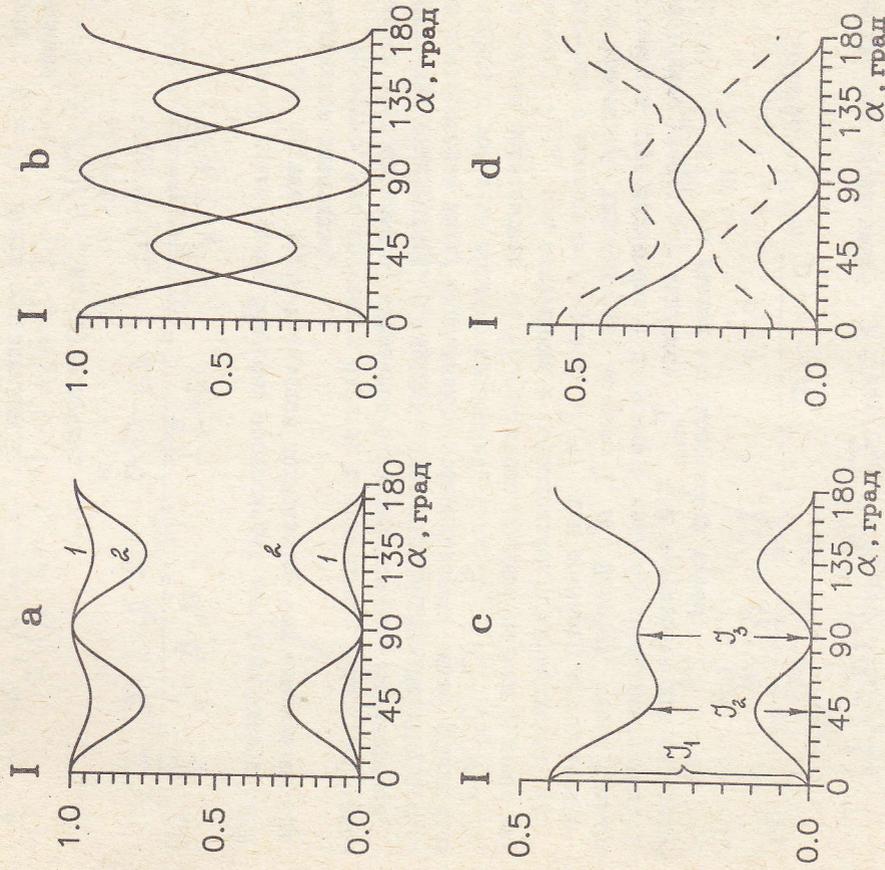


Рис. I. Зависимость интенсивности света $J(\alpha)$ от угла поворота пластины при скрещенных (нижние кривые) и параллельных поляризаторах (верхние кривые).
 а) $\Delta = 30^\circ$, $\delta = 0,2$; б) $\Delta = 60^\circ$, $\delta = 0,2$, $m = 0,448$.
 в) $\Delta = 60^\circ$, $\delta = 0,2$; д) $\Delta = 70^\circ$, $\delta = 0,2$, $m = 0,448$.

Наиболее простые соотношения получаются при параллельных поляризаторах ($\delta = 0$). Введя обозначения $J_0 = J_1$, $J_{90} = J_3$, $J_{45} = J_2$ и учитывая, что $\alpha_{II} = (J_1 + J_3 + 2J_2)/4$, $\beta_{II} = (J_1 - J_3)/2$, $C_{II} = (J_1 + J_3 - 2J_2)/4$, из (2) получим:

$$\cos \Delta = \frac{\alpha_{II} - 3C_{II}}{\sqrt{(\alpha_{II} - C_{II})^2 - \beta_{II}^2}} = \frac{4J_2 - (J_1 + J_3)}{2\sqrt{J_1 J_3}}, \quad e = \frac{\delta J_1 + \beta_{II} + C_{II}}{\alpha_{II} - \beta_{II} + C_{II}} = \frac{J_1}{J_3}. \quad (3)$$

В этой главе также получены соотношения для определения $\cos \Delta$ и $e^{\pm \delta}$ для случая, когда вращается поляризатор или анализатор при неподвижной пластинке.

Известно, что во многих случаях в кристаллах наблюдается аномальное дупреломление, связанное с различными неоднородностями, дефектами, включениями, примесями, структурными нарушениями и т.д. При исследовании между скрещенными поляризаторами таких кристаллов невозможно добиться полного погасания, т.е. $J_{min}^{\pm} = J_{90}^{\pm} \neq 0$. Вся кривая зависимости $J(\alpha)$ одинаково поднята по оси ординат на величину J_{min}^{\pm} при скрещенных и параллельных поляризаторах по сравнению с аналогичной кривой $J(\alpha)$ для обычного дупреломляющего кристалла, как показано на рис. 1, а. Поэтому, чтобы правильно оценить дупреломление и дихроизм в неоднородных кристаллах, необходимо учесть эту величину J_{min}^{\pm} . В результате для определения $\cos \Delta$ и $e^{\pm \delta}$ с учетом неоднородности имеем:

$$\cos \Delta m = \delta J_{45} \frac{p-1}{p+1-2m}, \quad e^{\pm \delta m} = \frac{z_1 - m}{z_3 - m}. \quad (4)$$

где введены обозначения $p = J_{45}''/J_{45}' = (\alpha_{II} - C_{II})/(\alpha_1 + C_1)$,

$$m = \frac{J_0^{\pm}}{J_1^{\pm}} = \frac{\alpha_1 - C_1}{\alpha_1 + C_1}, \quad z_1 = \frac{J_0''}{J_{45}''} = \frac{\alpha_{II} + \beta_{II} + C_{II}}{\alpha_1 + C_1},$$

$$z_3 = \frac{J_{90}''}{J_{45}''} = \frac{\alpha_{II} - \beta_{II} + C_{II}}{\alpha_1 + C_1}. \quad \text{Определенные таким образом } \Delta m \text{ и } \delta m$$

позволяют вычислить интегральное дупреломление и дихроизм исследуемого кристалла. Для прозрачных кристаллов или при малых δm можно использовать номограмму для оценки величины Δm с учетом p и m , как показано на рис. 2, а, б. На рис. 2, а номограмма построена для случая $p > 1$, т.е. Δ изменяется от 0 до 90° . На рис. 2, б для случая $p < 1$, т.е. Δ изменяется от 90° до 180° . Измерив значения

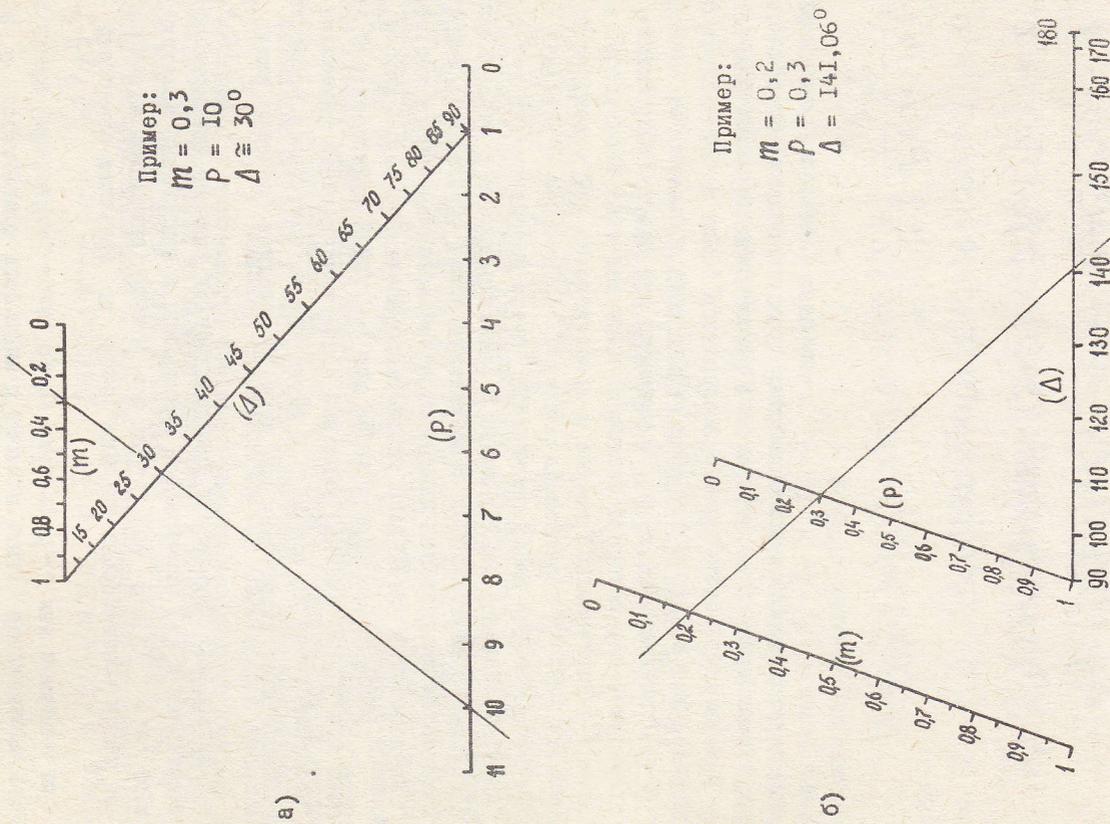


Рис. 2. Номограмма для определения разности фаз Δ .

а) при $p > 1$, $0 \leq \Delta \leq 90^\circ$,
 б) при $p < 1$, $90 \leq \Delta \leq 180^\circ$.

и Р исследуемой пластинки и провести линию, соединяющую точки с этими значениями, можно сразу оценить Δm , как показано на рис. 2, а, б.

Введенная величина m может служить качественной мерой неоднородности кристалла. Видно, что $m = 0$ при $\alpha_1 = c_1$, т.е. образец является однородным и полученные соотношения (4) и номограмма справедливы для обычных двуупломящих дихроичных кристаллов при $m = 0$.

Таким образом, получены формулы для вычисления двуупломяния и дихроизма кристаллов, в том числе и с учетом их неоднородности. Все выражения представлены через значения функции $J(\alpha)$ при некоторых фиксированных углах α или через коэффициенты Фурье.

Вторая глава посвящена определению оптических анизотропных параметров в низкосимметричных поглощающих гиротропных кристаллах, в которых собственные волны эллиптически поляризованы с различной эллиптичностью и ортогональны. В общем случае выражение, полученное для интенсивности света, прошедшего через систему поляризатор - кристалл - анализатор, довольно громоздкое. Поэтому приведем только выражения для интенсивности в случае ортогонального приближения собственных волн для двух вариантов расположения поляризатора и анализатора, когда они скрещены (J^+) и параллельны (J''). Тем более, что именно в этом случае возможно получить все соотношения в аналитическом виде, практически ортогональное приближение справедливо для всех направлений в кристалле за исключением узкой области вблизи оптических осей. Выражение для интенсивности в этом случае можно представить в виде:

$$J = \frac{J_0 e^{-\delta}}{4(1+k_1 k_2)^2} (a + b_1 \cos 2\alpha + b_2 \sin 2\alpha + c_1 \cos 4\alpha + c_2 \sin 4\alpha), \quad (5)$$

где $a_1 = [(1+k_1^2 k_2^2) + 3(k_1^2 + k_2^2)](c_1 \delta - \cos 3\Delta)$,

$$a_{11} = c_1 \delta [(1+k_1^2 k_2^2) + 3(k_1^2 + k_2^2)] + \cos \Delta [1+k_1^2 k_2^2 + 8k_1 k_2 - k_1^2 - k_2^2],$$

$$b_1^+ = -4(k_2^2 - k_1^2)(c_1 \delta - \cos 3\Delta), \quad b_1'' = 4(1 - k_1^2 k_2^2) \delta \sin \delta,$$

$$b_2^+ = 0, \quad b_2'' = -4(k_1 - k_2)(1 + k_1 k_2) \sin \Delta,$$

$$c_1^+ = -(1+k_1^2 k_2^2 - k_1^2 - k_2^2)(c_1 \delta - \cos 3\Delta), \quad c_1'' = -c_1^+,$$

$$c_2^+ = 0, \quad c_2'' = 0.$$

здесь $\Delta = (2\pi d/\lambda)(n_2 - n_1)$, $\delta = (2\pi d/\lambda)(x_2 - x_1)$, $(n_2 - n_1)$ - эллиптическое двуупломяние, $(x_2 - x_1)$ - эллиптический дихроизм, k_1, k_2 - эллиптичности собственных волн, запиравные таким образом, что при переходе к относным оптическим кристаллам, у которых эллиптичности можно считать одинаковыми и обращение по эллипсам поляризации противоположным, следует $k_1 = k_2 = k$; в низкосимметричных поглощающих кристаллах, у которых обращение по эллипсам поляризации одинаково, следует считать $k_1 = -k_2 = \delta$. В общем случае в ортогональном приближении оправдлив принцип суперпозиции эллиптичностей $k_1 = k + S$, $k_2 = k - S$. На рис. 3 приведены зависимости интенсивности света $J(\alpha)$ для различных значений k_1 и k_2 при $\Delta = 50^\circ$, $\delta = 0,1$. Из рис. 3 видно, что при скрещенных поляризаторах при $|k_1| = |k_2|$ кривая зависимости $J^+(\alpha)$ поднята вверх и этот подъем определяется эллиптичностью собственных волн, причем $J_0^+ \neq J_0''$, если $k_1 \neq k_2$. В этом случае из отношения величин b_1/α_1 и c_1/α_1 получены выражения для вычисления k_1 и k_2 в виде

$$k_{1,2}^2 = \frac{(\alpha_1 + 3c_1) - 2\sqrt{2c_1(\alpha_1 + c_1) + b_1^2}}{\alpha_1 - c_1} \approx b_1 \quad (6)$$

Определить знак k_1 и k_2 из таких измерений не представляется возможным. Из измерений при параллельных поляризаторах, взяв отношение величин $b_1'' = b_{11}$ и $c_1'' = c_{11}$, величине α_{11} , получены выражения для определения $\cos \Delta$ и $e^{2\delta}$:

$$\cos \Delta = \rho/\alpha, \quad e^{2\delta} = \frac{A+B+C}{A-B+C} \quad (7)$$

где $A = \alpha_{11}(1 - k_1^2 k_2^2)(1 + k_1^2 k_2^2 - k_1^2 - k_2^2)$,

$$B = b_{11}(1 + k_1^2 k_2^2 + 2k_1 k_2)(1 + k_1^2 k_2^2 - k_1^2 - k_2^2),$$

$$C = c_{11}(1 - k_1^2 k_2^2)(1 + k_1^2 k_2^2 + 8k_1 k_2 - k_1^2 - k_2^2),$$

$$\rho = (1 - k_1^2 k_2^2)[\alpha_{11}(1 + k_1^2 k_2^2 - k_1^2 - k_2^2) - c_{11}(3 + 3k_1^2 k_2^2 + k_1^2 + k_2^2)],$$

$$Q = \left\{ (1 - k_1^2 k_2^2)[\alpha_{11}(1 - k_1^2 k_2^2 - k_1^2 - k_2^2) + c_{11}(1 + k_1^2 k_2^2 + 8k_1 k_2 - k_1^2 - k_2^2)] - b_{11}^2 (1 + k_1^2 k_2^2 - k_1^2 - k_2^2)^2 / (1 + k_1^2 k_2^2 + 2k_1 k_2) \right\}^{1/2}.$$

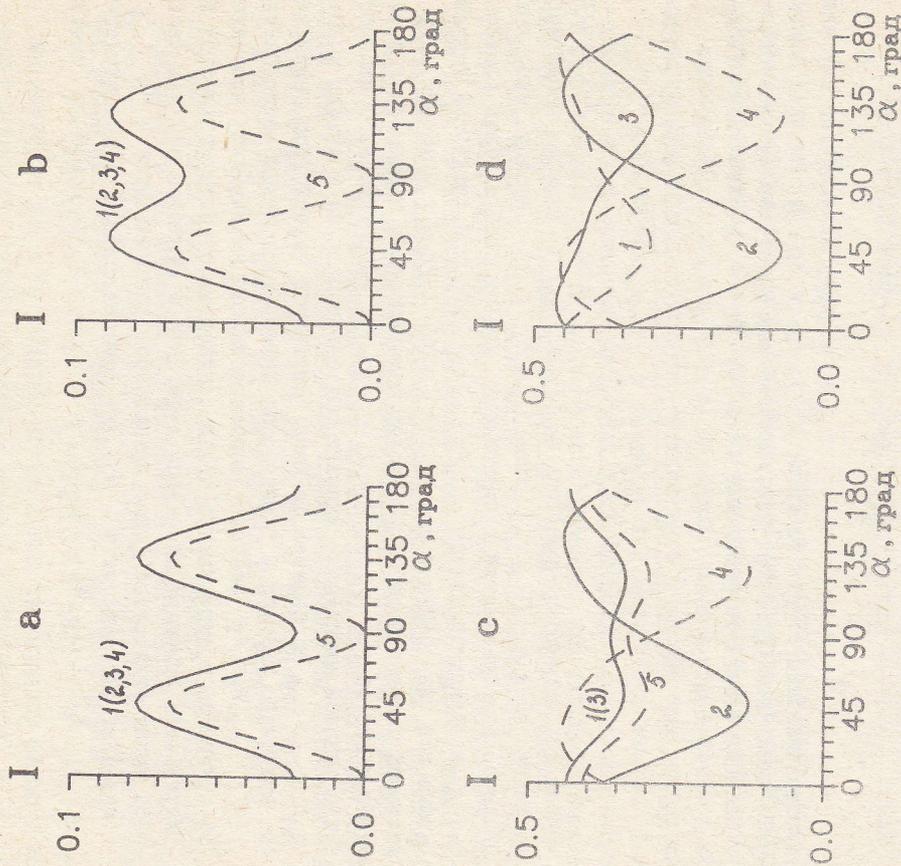


Рис. 3. Зависимость интенсивности света $I(\alpha)$ от угла поворота пластины при скрещенных (α, b) и параллельных (c, d) поляризаторах для гирированных и поглощающих кристаллов ($\Delta = 50^\circ, \delta = 0, 1$).

- a, c) 1 - $K_1 = 0,3, K_2 = 0,3$; 2 - $K_1 = 0,3, K_2 = -0,3$;
 3 - $K_1 = -0,3, K_2 = -0,3$; 4 - $K_1 = -0,3, K_2 = 0,3$;
 5 - $K_1 = K_2 = 0$
- b, d) 1 - $K_1 = 0,3, K_2 = 0,5$; 2 - $K_1 = -0,3, K_2 = 0,5$;
 3 - $K_1 = -0,3, K_2 = -0,5$; 4 - $K_1 = 0,3, K_2 = -0,5$.

Следовательно, определив K_1^2 и K_2^2 при скрещенных поляризаторах, из полученных соотношений вычитаются эллиптическое дугореломление Δn и эллиптический дихроизм Δk . В случае неортогональных боковых волн искомые параметры можно получить с помощью минимизации функции многих переменных. В этой же главе показано, что в кристаллах в тех случаях, когда справедлив принцип суперпозиции двух преломлений, можно определить склярный параметр гирации из соотношения

$$G = \Delta n \bar{n} \frac{2K}{1+K^2} \quad (8)$$

Получены также выражения для вычисления ориентации оптической оси кристаллов. В этой главе показана возможность определения компонента псевдотензора гирации в кристаллах различных классов симметрии.

В третьей главе описана установка, с помощью которой реализован метод определения оптических параметров кристаллов. Экспериментальная установка создана на базе спектрального комплекса КСВУ, в состав которого входят монохроматор с дифракционной решеткой, фотоприемные головки с фотозлектронными умножителями, цифровой вольтметр, микро-ЭВМ и печатающее устройство. Спектральный комплекс работает в однолучевом режиме. Поляризационное устройство, которым дополнен стандартный комплекс КСВУ, состоит из поляризатора, анализатора (призма Глана из исландского шпата) в специальных держателях, снабженных угловыми лимбами и такого же держателя для образца. При измерениях возможны два варианта: поворот образца или одновременный поворот поляризатора и анализатора с определенным заданным шагом. Поворот осуществляется электрическими импульсами напряжением 24 В и длительностью 0,2 сек., которые вырабатываются в управляющем устройстве по специальной программе. Весь процесс измерений и вычислений полностью автоматизирован и ведется с помощью написанной и отлаженной программы, хранящейся на магнитной ленте для микро-ЭВМ "Электроника ДЭ-28". Для начала работы программа требует задания входных параметров: начальной и конечной длин волн, шага сканирования по длинам волн, а также число отсчетов системы измерения, шага поворота образца и его толщину. После того как процесс измерений закончен, программа обеспечивает вычисление спектра поглощения, коэффициентов Фурье и искоемых параметров, характеризующих анизотропные оптические свойства кристаллов - дихроизм, двуупреломление, эллиптичность собственных волн по формулам, составленным в основу метода, как описано в главах I и 2. Выдача результатов изме-

рений выдается в табличном или графическом виде. По количеству в предлагаемом методе имеются два варианта расчетных формул, то из теории ошибок подсчитана средняя квадратичная ошибка определения коэффициентов Фурье и дискретных значений пропускания. Показано, что ошибка определения Фурье-амплитуд даже без специальных ухищрений обычно не превышает $\sim 10^{-3}$. С помощью проведенного анализа установлено, что ошибка в определении Δ не хуже $\pm 0,2^\circ$, что приводит к ошибке в определении двупреломления обычно $\Delta n \sim 1 \cdot 10^{-6}$, ошибка в определении δ порядка $4 \cdot 10^{-4}$, т.е. для дихроизма $\Delta \chi$ ошибка $\sim 10^{-7}$. Величина K может определяться с точностью $\pm 1 \cdot 10^{-3}$. В этой главе также описываются приборы для проведения вискозиметрических и низкотемпературных измерений.

В четвертой главе приведены экспериментальные результаты некоторых кристаллов, полученные с помощью предложенного метода. В первую очередь проведены исследования кристаллов кварца, окрашенных в зеленый и коричневый цвета с примесью железа (Fe^{2+} , Fe^{3+}) соответственно. Для этих кристаллов определены дисперсии двупреломления, дихроизма, скалярного параметра гирации и ориентации оптической оси. На рис. 4 приведены полученные данные для коричневого кварца толщиной $d = 2,48$ мм. Например, для этого кристалла при $\lambda = 0,55$ мкм получены следующие характеристики: $K = 0,286$, $\Delta = -98,68^\circ + 360^\circ$, $\delta = 0,256$, $\varphi = 7,132^\circ$. Отсюда вычислены оптические параметры: $\Delta n = 1,61 \cdot 10^{-4}$, $\Delta \chi = 9,03 \cdot 10^{-6}$, $G = 1,358 \cdot 10^{-4}$, $\beta = 4,93 \cdot 10^{-5}$. Таким же образом получена дисперсия компонентов псевдотензора гирации β_{ij} и проведено сравнение с данными других авторов, при этом получено хорошее согласие. Таким образом, на примере кристаллов кварца показана возможность определения не только двупреломления и дихроизма, но также и компонент псевдотензора гирации.

В этой главе приведены данные по исследованию коричневых и розовых кристаллов алмаза, из которых были вырезаны пластинки толщиной ~ 1 мм. Все исследованные кристаллы были пластически деформированными и неоднородными. Поэтому оценка величины двупреломления проводилась с учетом их неоднородности, как было описано в § 1.5. Например, в кристалле № 104 толщиной $d = 0,9$ мм с однонаправленным проявлением пластической деформации получены значения: $\rho = 0,895$, $m = 0,316$, из которых вычислены: $\Delta m = 94,73^\circ$, $\delta m = 3,85 \cdot 10^{-2}$ и соответственно $\Delta n = 16,67 \cdot 10^{-5}$, $\Delta \chi = 3,87 \cdot 10^{-6}$. Для кристалла № 123 толщиной $d = 0,8$ мм, пластически деформированного в двух направлениях, оказалась $\rho = 1,45$, $m = 0,867$, откуда получены значе-

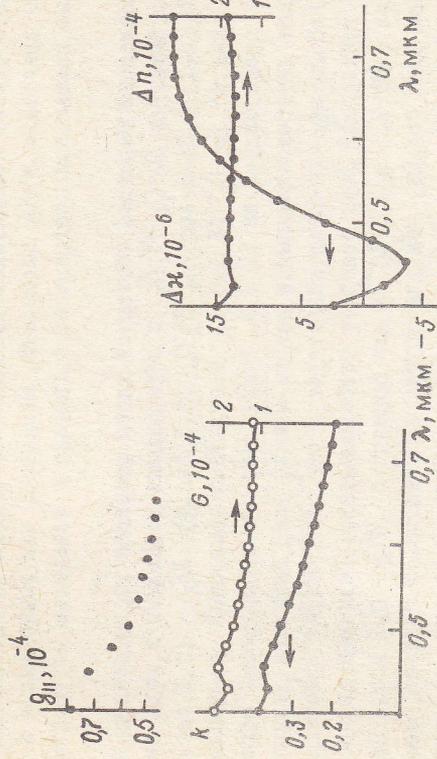


Рис. 4. Зависимость псевдотензора гирации β_{ij} , скалярного параметра гирации G , эллиптичности собственных волн K , двупреломления Δn , дихроизма $\Delta \chi$ для кварца.

ния: $\Delta n_m = 10,16 \cdot 10^{-5}$, $\Delta \chi_m = -2,86 \cdot 10^{-6}$. В результате анализа полученных данных установлено, что у большинства кристаллов алмаза m является значительной величиной и неучет m приводит к существенным ошибкам при вычислении Δ и δ и соответственно двупреломления и дихроизма.

Были также исследованы χ -облученные пластически деформированные кристаллы LiF . Обнаружены двупреломление и дихроизм при $\lambda = 0,45$ мкм, обусловленные ориентацией оптических диполей в направлении $[010]$. При отжиге пластически деформированных кристаллов дихроизм исчезал при температуре около $250^\circ C$, следовательно полоса стала изотропной, т.е. диполи потеряли ориентацию.

Исследованы сравнительно недавно выращенные кристаллы фторидов $Na_{0,5-x}R_{0,5+x}F_{2+2x}$ ($R = Y, \text{Eu}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}, \text{Yb}$); $x = 0,1$; $x = 0,15$ в интервале длин волн от $0,4$ мкм до $0,75$ мкм. Обнаружены двупреломление и дихроизм во всех исследованных образцах, Δn изменяется в пределах $(0,5 + 1,5) \cdot 10^{-5}$, а в наиболее сильной полосе поглощения с $R = \text{Ho}$ при $\lambda = 0,45$ мкм $\Delta n \sim 5,5 \cdot 10^{-5}$. В этих же образцах наблюдается дихроизм в полосах поглощения. Наибольшая величина $\Delta \chi \sim 1,7 \cdot 10^{-5}$ в кристаллах с $R = \text{Ho}$ при $\lambda = 0,45$ мкм.

Проведена оценка показателей преломления, исходя из химической формулы кристалла и его плотности. Показано, что вычисленные и измеренные показатели преломления совпадают с точностью до третьего знака.

Последний параграф четвертой главы посвящен исследованию кристаллов флюидов $ZrO_2 - Y_2O_3$ с легирующими добавками в виде оксидов WO_3 (0,1; 0,5; 1 вес.%), Cr_2O_3 (0,1 вес.%), Mb_2O_3 (0,1 вес.%), SrO (2,5 вес.%), Ca_2O_3 (5 вес.%). Результаты измерений оптических свойств представлены на рис. 5. Видно, что все исследуемые образцы оказались двуупреломляющими и дихроичными, хотя величина двуупреломления небольшая, она свидетельствует о том, что чистые кристаллы помимо кубической фазы содержат тетрагональную. Величина двуупреломления ($M \sim 2,5 - 3,5 \cdot 10^{-5}$) для образца с $WO_3 - 0,1$ вес. % почти в три раза больше, чем для других кристаллов. В образце, содержащем эрбий, наблюдается аномальный ход двуупреломления, связанный с полосой поглощения в области 0,51 мкм. На этих же образцах измерены плотность, микротвердость и параметры решетки. Результаты измерения для кристаллов с примесью WO_3 в различных концентрациях приведены на рис. 6. Видно, что при концентрации $WO_3 - 0,1$ вес. % все перечисленные свойства обнаруживают аномалию. Наблюдаемая корреляция между изменением параметра решетки, микротвердости и концентрации примеси WO_3 дает основание полагать, что изменение величины микротвердости обусловлено изменением структуры кристалла в результате легирования. Таким образом, полученные экспериментальные результаты свидетельствуют о том, что все исследованные кристаллы $ZrO_2 - Y_2O_3$ содержат тетрагональную фазу и не являются до конца упорядоченными. Легирование кристаллов различными элементами приводит к изменению физических свойств, при этом наблюдается корреляция оптических, механических свойств и структуры всех исследованных кристаллов.

Таким образом, предложенным методом исследованы в основном кубические кристаллы, у которых двуупреломление и дихроизм связаны с различными несовершенствами структуры и величины оптических анизотропных параметров достаточно малы, поэтому для исследования таких кристаллов необходимы прецизионные методы.

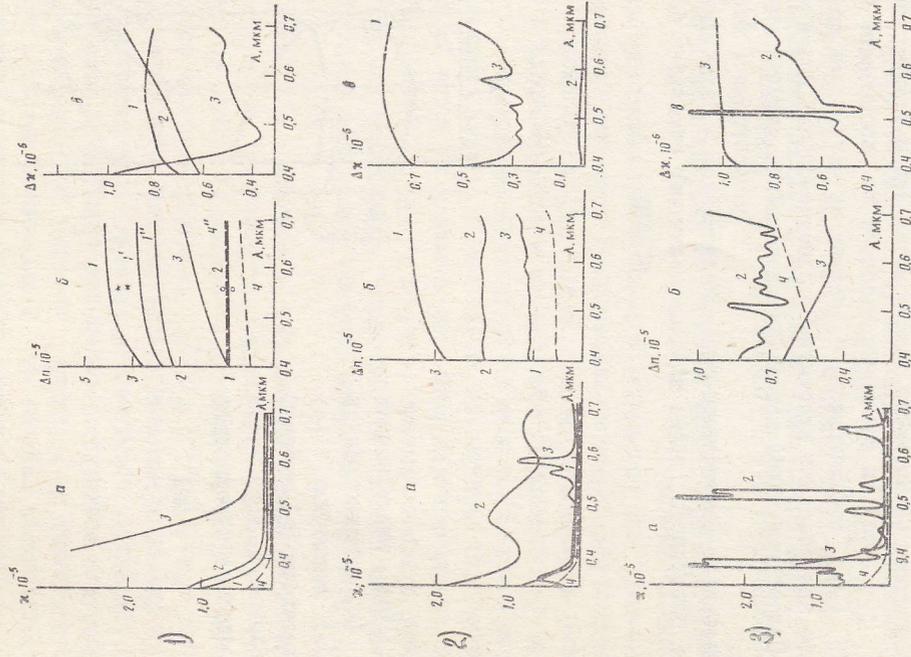


Рис. 5. Дисперсия коэффициентов поглощения (а), двуупреломления (б) и дихроизма (в) кристаллов флюидов $ZrO_2 - Y_2O_3$.

- 1) I, 1, I - W (0,1 вес.%), 2 - W (0,5 вес.%), 3 - W (1 вес.%), 4, 4' - чистый; ж, о - значения двуупреломления образцов, измеренные с помощью компенсатора Береза для образцов с 0,1 вес. % W и для чистых соответственно.
 2) 1 - W (0,1 вес.%), 2 - Cr (0,1 вес.%), 3 - Nb (0,1 вес.%), 4 - чистый.
 3) 2 - Er (5 вес.%), 3 - Au (2,5 вес.%), 4 - чистый.

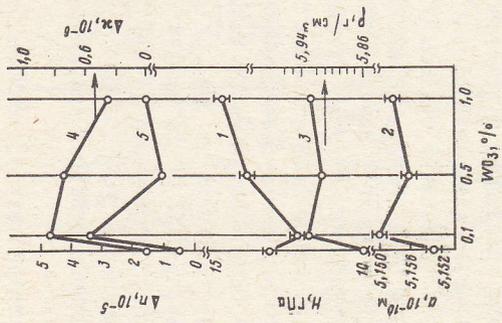


Рис. 6. Зависимость микротвердости (1), параметра решетки (2), плотности (3), дихроизма (4), дупреломления (5) от концентрации WO₃.

Выводы

1. Получено выражение для интенсивности света, прошедшего через систему поляризатор - низкосимметричный поглощающий оптически активный кристалл - анализатор. На основании анализа полученного выражения предложен спектрально-фотометрический метод одновременного определения анизотропных оптических параметров кристаллов по измерению интенсивности $J(\alpha)$ прошедшего света в зависимости от поворота пластинки на угол α .
2. Получены аналитические соотношения, позволяющие вычислять эллиптичность собственных волн из измерений $J(\alpha)$ при скрещенных поляризаторах, дупреломление и дихроизм из измерений $J(\alpha)$ при параллельных поляризаторах.
3. Создана установка на базе спектрального прибора КСВУ, позволяющая проводить измерения в автоматическом режиме интенсивности прошедшего света с помощью фурье-анализа функции $J(\alpha)$.
4. Получены соотношения для определения оптических параметров кристаллов с учетом их неоднородности. Проведено исследование анизотропных свойств окрашенных кристаллов алмаза. Обнаружены дупреломление и дихроизм в χ -облученных пластически деформированных

кристаллах Δn при $\lambda = 0,45$ мкм.

5. Определен скалярный параметр гирации и вычислена компонента псевдотензора гирации g_{11} в кристаллах кварца с примесью железа, совпадающая по величине с данными, полученными другими авторами. Показана возможность определения компонента псевдотензора гирации в кристаллах предложенным спектрально-фотометрическим методом.
 6. Измерены величины дупреломления и дихроизма в кристаллах фторидов $Na_{0,5-x}R_{0,5+x}F_{2+2x}$ с редкоземельными элементами. Проведена оценка показателя преломления, исходя из химической формулы кристалла и его плотности. Показано, что вычисленные и измеренные показатели преломления совпадают с точностью до третьего знака.
 7. Изучены оптические свойства кристаллов флюоритов $CaO_2 \cdot Y_2O_3$, легированных различными примесями. Обнаружено, что все кристаллы обладают дупреломлением $\sim 0,5 - 3,5 \cdot 10^{-5}$ и дихроизмом, т.е. содержат тетрагональную фазу и не являются до конца упорядоченными. Показано, что наблюдается корреляция оптических, механических свойств и структуры всех исследованных кристаллов.
 8. Исследованы дупреломление и микротвердость в кристаллах флюоритов в интервале температур 20 - 400 °C. Показано, что во всех кристаллах при повышении температуры указанные свойства изменяются монотонно, при понижении температуры до комнатной эти величины остаются неизменными.
- Основные результаты диссертации опубликованы в следующих работах:
1. Константинова А.Ф., Гречушников Б.Н., Улуханов И.Т., Степанов А.Н. Метод определения дихроизма и дупреломления кристалла с помощью спектрофотометра // В сб. Оптика анизотропных сред. - М.: МӨТИ, 1987. - С. 44-46.
 2. Константинова А.Ф., Степанов А.Н., Гречушников Б.Н., Улуханов И.Т. Исследование ориентационной зависимости пропускания системы поляризатор - кристалл - анализатор // Кристаллография. - 1990. - Т. 35. - В. 2. - С. 429-432.
 3. Konstantinova A.F., Grechushnikov B.N., Ulukanov I.T. and Kochkov A.I. Determination of optical parameters of Crystals // Twelfth European Crystallographic Meeting: Collected abstracts - Moscow, 1989. - P. 364-365.
 4. Улуханов И.Т., Константинова А.Ф. Исследование дисперсии оптических параметров кристаллов: Тезисы I республиканской конференции молодых ученых и специалистов по физике. - Фрунзе, 1990. - С. 183-185.

5. Степанов А.Н., Константинова А.Ф., Гречушников Б.Н., Улуханов И.Т. Определение оптических параметров кристаллов с искусственной анизотропией //Семинар "Новые поляризационные методы и приборы для исследования напряженно-деформированного состояния и анализа состава и молекулярной структуры веществ": Тезисы докл. - Л., 1988. - С. 41-42.
6. Улуханов И.Т., Гречушников Б.Н., Константинова А.Ф. Двупреломление и дихроизм δ -облученных деформированных кристаллов LiF //II республиканская конференция по физике диэлектриков и полупроводников: Тезисы докл. - Ом, 1989. - С. 162-163.
7. Константинова А.Ф., Улуханов И.Т., Гречушников Б.Н. Дихроизм χ -облученных деформированных кристаллов LiF //Седьмая всеобщая конференция по радиационной физике и химии неорганических материалов: Тезисы докл. - Рига, 1989. - С. 257-258.
8. Быстрова А.А., Глушкова Т.М., Киселев Д.Ф., Константинова А.Ф., Кривандина Е.А., Соболев Б.Л., Улуханов И.Т., Фирсова М.М., Штыркова А.П. Исследование некоторых физических свойств кристаллов фторидов $\text{Na}_{0,5-x}\text{R}_{0,5+x}\text{F}_{2+2x}$ ($\text{R} = \text{Y}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Er}, \text{Tm}, \text{Yb}$) //9 всеобщий симпозиум по спектроскопии кристаллов, активированных ионами редкоземельных и переходных металлов: Тезисы докл. - Л., 1990. - С. 72.
9. Knab G.G., Konstantinova A.F., Uluhanov I.T., Hartmanova M., Hanic F., Urusovskaya A.A., Iofin N.A., Zuzanova I.L. Optical and mechanical properties of doped $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$ single crystals //Symr. on physics of optical crystals (SPOC) = Vidarest, 1989. - P. 20.
10. Кнаб Г.Г., Константинова А.Ф., Улуханов И.Т., Гартманова М., Ганиц Ф., Урусовская А.А., Иофин Н.А., Зюзанова И.Л. Влияние активаторов на оптические и механические свойства кристаллов $\text{ZrO}_2\text{-Y}_2\text{O}_3$ //Кристаллография. -1990.-Т. 35. - В. 4. - С.923-929.
11. Улуханов И.Т. Определение степени неоднородности некоторых кубических кристаллов //III конференция научно-учебного центра "Применение физико-химических методов исследования в науке и технике" - М., 1990. - С. 105.
12. Константинова А.Ф., Степанов А.Н., Улуханов И.Т., Гречушников Б.Н. Способ определения параметров оптической анизотропии кристаллов. - Заявка № 4836307/25 от 21 июня 1990 г.