

ВЛИЯНИЕ МЕЖЗЕРЕННЫХ ГРАНИЦ НА ОСЛАБЛЕНИЕ ПОТОКА ИЗЛУЧЕНИЯ В ПОЛИКРИСТАЛЛАХ ZnSe

Б. М. Слепченко, В. В. Мусатов, А. Я. Аксеновских, А. Н. Брызгалов,
Г. И. Романова

В последнее время в инфракрасной оптике все более широкое применение находят поликристаллические материалы группы $A^{II}B^{VI}$. Это связано с рядом преимуществ в технологии получения по сравнению с монокристаллами, однако в поликристаллах имеется дополнительный источник потерь излучения — рассеяние на границах зерен.

Межзеренную границу можно рассматривать как тонкую прослойку с отличающимся от кристаллитов показателем преломления. Оценку параметра неоднородности $\xi = \Delta n/n$ (Δn — разность показателей преломления межкристаллитного вещества и кристаллитов, n — показатель преломления кристаллитов) можно получить исходя из дислокационной модели межзеренной границы. При этом $\xi \approx n^2 C \sigma$ [1], где C — средняя константа фотоупругости материала, а напряжение сдвига σ , создаваемое стенкой краевых дислокаций с «шагом» h , по порядку величины равно $\sigma \approx G (a/h)^2$, где G — модуль сдвига; a — межатомное расстояние: в рамках модели $h \approx (10 \div 100) a$.

Имея в виду в дальнейшем приложение к поликристаллам ZnSe, для численных оценок используем значения констант этого материала [3]: $C_1 = 2.7 \cdot 10^{10}$ Н/м², $C_2 = 0.2 \cdot 10^{-12}$ м²/Н. В результате $\sigma \approx 2.7 \cdot 10^8 \div 2.7 \cdot 10^9$ Н/м², $\xi = 3.1 \cdot 10^{-3} \div 3.1 \cdot 10^{-4}$, где использовано значение показателя преломления ZnSe в ИК области спектра $n = 2.4$ [4]. В силу малости ξ в случае, когда средний размер кристаллитов \bar{d} и длина волны излучения λ таковы, что $\bar{d} \gg \lambda$, можно предположить, что механизм рассеяния на границах зерен есть отражение излучения от них. (В случае $\bar{d} \leq \lambda$ необходимо учитывать дифракционные эффекты [5]).

Одна из основных характеристик элементов проходной оптики — светопропускание в рабочей области спектра. Показатель ослабления потока излучения μ в предположении о хаотической ориентации зерен равен

$$\mu = (\bar{d})^{-1} \bar{R}(\xi), \quad (1)$$

где $\bar{R}(\xi)$ — усредненный по углам падения коэффициент отражения. Если считать «потерянным» любой луч, отклонившийся вследствие отражения даже на очень малый угол (такая ситуация имеет место при спектральнофотометрическом методе определения μ), то

$$\bar{R}(\xi) = (2/\pi) \int_0^{\pi/2} R(\varphi, \xi) d\varphi, \quad (2)$$

где φ — угол падения, $R(\varphi, \xi)$ — коэффициент отражения от плоскопараллельной пластинки толщиной $\sim h$ с относительным показателем преломления $1 + \xi$, определяемый из известных формул геометрической оптики [6]. В силу $h/\lambda \ll 1$ (так как $\lambda \approx 10$ мкм) следует учитывать интерференционные эффекты; при этом в вычислениях полагали $(4\pi/\lambda)nh = 0$.

Расчет по формуле (2) проводили на ЭВМ с точностью $\sim 1\%$. Для сокращения машинного времени использовалась особенность поведения функции $R(\varphi, \xi)$ — быстрое падение при малых ξ с уменьшением φ , начиная от $\pi/2$. В связи с этим суммирование в (2) начиналось от $\varphi = \pi/2$ с шагом $10^{-2} \pi/180$, а затем при $R(\varphi, \xi) < 10^{-2}$ суммирование шло с шагом $\pi/180$. Этим обеспечивалась необходимая точность вычислений и существенно сокращалось время счета по сравнению со стандартной программой.

В результате оказалось, что с изменением ξ от $3.0 \cdot 10^{-4}$ до $3.0 \cdot 10^{-3}$ $\bar{R}(\xi)$ меняется в пределах от $8.7 \cdot 10^{-3}$ до $2.7 \cdot 10^{-2}$.

Показатель ослабления серии оптических керамик ZnSe, отличающихся средним размером зерен (пределы \bar{d} от 0.5 до 2.5 мкм), определяли спектрофотометрическим способом. Используя (1), нашли, что в ИК области спектра в исследованных материалах $\bar{R}(\xi)$ находится в пределах от 6.1×10^{-3} до $3.1 \cdot 10^{-2}$. Хорошее согласие экспериментальных данных с расчетными указывает на то, что отражение от межзеренных границ является, по-видимому, основным механизмом потерь энергии излучения в полукристаллах.

Создание в процессе получения оптического поликристалла условий для преимущественной ориентации зерен позволило бы уменьшить рассеяние на их границах, поскольку число отражений от границ может при этом значительно уменьшиться. Существенна и химическая чистота границ, влияющая на параметр ξ . С этой точки зрения весьма перспективно получение поликристаллического ZnSe методом осаждения из газовой фазы (CVD) [7].

Авторы благодарят Е. Д. Сереженко за полезные обсуждения.

Список литературы

- [1] Емелин В. Я., Классен Н. В., Осипьян Ю. А., Табеев Э. Ф. // Препринт ИФТТ. Черноголовка, 1980. 10 с.
- [2] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости. М.: Наука, 1987. 248 с.
- [3] Блистанов А. А., Бойдаренко В. С. и др. Акустические кристаллы. Справочник / Под ред. М. П. Шаскольской. М.: Наука, 1982. 632 с.
- [4] Кулаков М. П., Фадеев А. В. // Изв. АН СССР, неорг. матер. 1980. Т. 16. № 1. С. 159—161.
- [5] Брызгалов А. Н., Слепченко Б. М., Мусатов В. В., Виравчев Б. П., Романова Г. И. // Изв. АН СССР, неорг. матер. 1989. Т. 25. № 9. С. 1430—1433.
- [6] Сивухин Д. В. Оптика. М.: Наука, 1985. 752 с.
- [7] Владыко М. Н., Дерновский В. И., Татарченко В. А. // Изв. АН СССР, неорг. матер. 1986. Т. 22. № 2. С. 208—210.

Челябинский государственный
педагогический институт
Челябинск

Поступило в Редакцию
4 апреля 1989 г.
В окончательной редакции
9 августа 1989 г.

УДК 539.219.3

Физика твердого тела, том 32, № 2, 1990
Solid State Physics, vol. 32, N 2, 1990

КВАНТОВАЯ ДИФФУЗИЯ ВОДОРОДА В ГИДРИДАХ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

А. И. Морозов, А. С. Сигов

Гидриды переходных металлов весьма перспективны для наблюдения квантовой диффузии. При комнатной температуре основной механизм диффузии водорода по междоузлиям металлической матрицы связан с классическими надбарьерными переходами. С понижением T их вероятность экспоненциально падает, а в области низких температур преобладающий механизм диффузии определяется туннельными переходами из одного междоузлия в другое. Тот факт, что характерный матричный элемент туннелирования для водорода в металле по порядку величины составляет $0.1—1$ К [1], позволяет утверждать, что этот переход должен происходить в экспериментально достижимой области температур. При этом падение коэффициента диффузии D с понижением температуры должно смениться его возрастанием [2].