

03;05;07;12

Ограничение кристаллов сапфира, выращиваемых из расплава способом Степанова

© Ю.Г. Носов, С.И. Бахолдин, В.М. Крымов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: yu.nosov@mail.ioffe.ru

(Поступило в Редакцию 28 апреля 2008 г.)

Методами фотогонографии и оптической микроскопии изучено проявление граней на цилиндрических монокристаллах сапфира, выращенных из расплава по способу Степанова. Установлены кристаллографические индексы обнаруженных граней и изучена микроструктура слоев роста. Установлена связь ограничения с условиями выращивания. Результаты сопоставлены с известными данными по ограничению кристаллов сапфира, выращиваемых раствор-расплавными методами и теоретическими расчетами удельной свободной поверхностной энергии граней.

PACS: 61.50.f, 81.10.Fq

Введение

Способ Степанова позволяет получать непосредственно из расплава монокристаллы заданной заранее формы. Управление формой в этом способе достигается за счет использования специального элемента — формообразователя, который формирует жидкий столб расплава с сечением, соответствующим сечению выращиваемого кристалла. Однако для монокристаллов характерно развитие на их поверхности естественных граней, которые также влияют на результирующую форму кристаллического изделия. В ряде случаев ограничение приводит к отклонению формы кристалла от задаваемой формообразователем. Так, наличие плоских граней на круглом стержне — это отклонение от цилиндричности.

Ограничение цилиндрических кристаллов изучалось ранее на примере монокристаллов германия [1]. В других случаях, наоборот, гранная форма является желательной. Примером может служить выращивание базисно-ограниченных лент сапфира [2–4], поверхность которых не просто гладкая, а образована атомно-гладкой базисной гранью $\{0001\}$ данного кристалла. Такие кристаллические пластины могут быть использованы без какой-либо дополнительной обработки как оптически прозрачные изделия или в качестве подложек в микроэлектронике.

Кроме решения практической задачи — управления формой и качеством поверхности профилированных монокристаллов — изучение ограничения кристаллов в процессе выращивания имеет большое значение для развития представлений о таких фундаментальных свойствах твердого тела, как свободная поверхностная энергия и определяемая ею равновесная форма кристалла.

Наиболее изучено ограничение кристаллов, выращиваемых из растворов и растворов-расплавов. Кристаллы, выращиваемые этими методами, обычно полностью или почти полностью ограничены, поскольку в процессе роста они окружены кристаллообразующей средой, а сам процесс ведется при относительно низких температурах с

малыми скоростями. На кристаллах, выращиваемых из расплава способами направленной кристаллизации, такими как метод Чохральского, Вернейля или способ Степанова, грани обычно менее развиты и их поверхность часто составлена из гранных и негранных участков. Закономерности формирования граней для этих методов изучены недостаточно.

В настоящей работе исследуется ограничение профилированных кристаллов сапфира в форме цилиндрических стержней различной кристаллографической ориентации. Целью работы было определение кристаллографических индексов проявляющихся граней, их размеров, тонкой структуры, а также зависимости ограничения от конструкции формообразователя и условий выращивания.

Методика эксперимента

Цилиндрические монокристаллы сапфира диаметром до 10 mm выращивались в атмосфере аргона со скоростью 0.5–1.2 mm/min. Использовалась стандартная осесимметричная тепловая зона с цилиндрическим графитовым нагревателем. Тигель и формообразователь были выполнены из молибдена. Выращены кристаллы следующих кристаллографических ориентаций $[0001]$, $[11\bar{2}0]$ и $[10\bar{1}0]$. Ориентация выставлялась с точностью до нескольких минут с помощью лазерной юстировки затравки непосредственно в ростовой камере [5].

Ограничение боковой поверхности цилиндрических монокристаллов сапфира изучалось с помощью оптического фотогонографа [1]. Ранее этот прибор успешно использовался для получения разверток боковой поверхности оптически непрозрачных кристаллов германия и антимионида индия. Принцип действия прибора состоит в следующем (рис. 1). Исследуемый кристалл 1 освещается параллельным пучком света 2. Луч, падающий на поверхность кристалла под углом 45° и отражающийся от нее, попадает через щель 3 на барабан с фотобумагой 4. При синхронном вращении кристалла

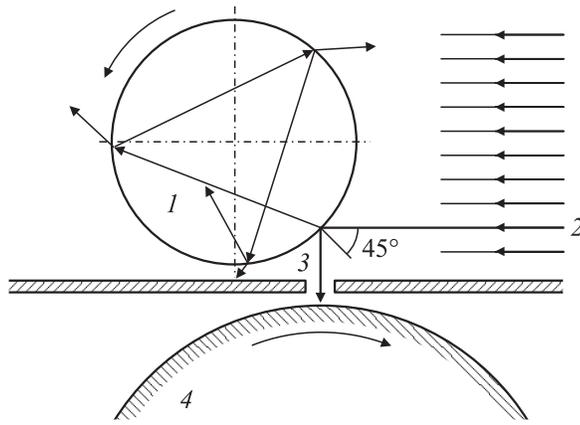


Рис. 1. Схема устройства фотогонониографа.

и барабана на фотобумаге регистрируется фотограмма боковой поверхности кристалла.

Зеркальные грани, параллельные направлению вытягивания, проявляются на фотограммах в виде узких черных полос. На практике из-за неизбежных ошибок ориентации затравки такие грани всегда наклонены к направлению вытягивания на небольшой угол. Если грань наклонена в сторону расплава, то она по-прежнему проявляется в виде зеркальной плоскости, содержащей отдельные ступени, и отображается на фотограмме черной полосой. Если грань оказывается отклоненной в противоположную сторону, то она может не образовывать зеркальной плоскости. В соответствующей угловой позиции обычно наблюдается небольшой выступ или излом поверхности, проявляющийся на фотограмме в виде белой полосы. Грани кристалла, наклоненные к направлению вытягивания на большие углы и обращенные в процессе выращивания к расплаву, проявляются на кристалле в виде относительно широких полос и также хорошо регистрируются на фотограммах.

Применимость этого метода к прозрачным монокристаллам сапфира вызывала сомнения по двум причинам. Во-первых, интенсивность отражения света от поверхности прозрачного кристалла значительно ниже, чем от практически зеркальной поверхности таких монокристаллов, как германий. Однако расчет по формулам зависимости коэффициента отражения от угла падения луча на границу раздела двух сред [6] показал, что при рабочем угле падения 45° интегральный коэффициент отражения для оптически гладкой поверхности сапфира равен $\sim 10\%$, что вполне достаточно для регистрации изображения светочувствительным материалом.

Во-вторых, вызвали опасения лучи освещающего потока, претерпевающие после преломления многократные отражения в кристалле. Если бы такие лучи могли попасть в регистрирующую щель прибора, то на фотограмме имело бы место наложение изображений различных участков поверхности кристалла. Детальное рассмотрение хода преломляющихся и отражающихся лучей в прозрачном кристалле показало, что возникновение ложных изображений практически невозможно.

Для примера на рис. 1 показан ход лучей для первых трех отражений внутри исследуемого кристалла. Следует отметить, что при каждом отражении внутри кристалла 90% света будет выходить из кристалла, и после нескольких отражений интенсивность этого луча станет пренебрежимо малой. Можно предположить, что многократное отражение большого числа лучей и их рассеяние на неровностях боковой поверхности кристалла и дефектах в его объеме даст некоторую паразитную засветку фотоматериала, но оно не может привести к появлению ложных изображений.

Практика съемки боковой поверхности монокристаллов сапфира показала, что на фотограммах регистрировались рефлексы лишь от тех граней, которые имеются на кристалле. В то же время фотограмма дает наглядное изображение всей боковой поверхности и позволяет определять угловые расстояния между гранями. Для приведенной на рис. 1 схемы угловая разрешающая способность прибора при определении положения рефлекса от зеркальной грани составляет

$$\delta \approx 45 \frac{b}{R},$$

где b — полуширина щели, а R — радиус кристалла. Для использованных в данной работе значений $b = 0.1 \text{ mm}$ и $R = 5 \text{ mm}$ величина δ составляет 0.9° .

Ширина граней измерялась с помощью оптического микроскопа с увеличением $28\times$. Структура слоев на гранях выращенных кристаллов изучалась с использованием интерференционного микроскопа МИИ-4 с увеличением $500\times$. Фотографии слоев выполнялись цифровой фотокамерой высокого разрешения.

Экспериментальные результаты

1. Ограничение боковой поверхности кристаллов ориентации [0001], выращенных с использованием формообразователей различной конструкции

Направление оптической оси [0001] было выбрано в качестве направления выращивания, поскольку оно является практически важным и используется в большинстве работ по выращиванию кристаллов сапфира из расплава.

Использовались три варианта конструкции формообразователя. Все они имели внешний диаметр 9.2 mm, диаметр капиллярного канала 1.2 mm, но отличались формой верхней поверхности. Эта поверхность была либо плоской, либо имела форму конуса с углом при вершине 150° или 90° . Указанные варианты конструкции формообразователя часто используются в практике выращивания кристаллов сапфира главным образом для управления распределением пор в кристаллах. Влияние угла конусности на ограничение кристаллов ранее не изучалось.

Ширина граней на боковой поверхности кристаллов ориентации $[0001]$

Конструкция формообразователя	Зеркальная грань призмы $a\{11\bar{2}0\}$, mm	Ступенчатая дорожка r' , образованная выходами грани $r\{10\bar{1}1\}$ на фронт кристаллизации, mm	Фотограмма
Плоский формообразователь, режим с высоким фронтом кристаллизации	0.8–0.9	2–2.5	Рис. 2, <i>a</i> , участок 1
Плоский формообразователь, режим с низким фронтом кристаллизации	0.3–0.5 отдельные участки	2–2.5	Рис. 2, <i>a</i> , участок 2
Конический формообразователь, угол конуса 150°	≤ 0.3	1.4–1.7	Рис. 2, <i>b</i>
Конический формообразователь, угол конуса 90°	0.1–0.2	~ 1	Рис. 2, <i>c</i>

Фотограммы кристаллов сапфира, выращенных с использованием различных формообразователей, представлены на рис. 2, а размеры граней — в таблице. (В таблице и далее используются буквенные обозначения наиболее распространенных граней сапфира [7]).

Оказалось, что в огранении боковой поверхности принимают участие грани трех типов: ромбоэдра $r\{10\bar{1}1\}$, гексагональной призмы $a\{11\bar{2}0\}$ и дигексагональной призмы $\{14\bar{5}0\}$. Ромбоэдр r , проявляющийся в этой ориентации в виде наклонных граней на фронте кристаллизации, на боковой поверхности дает три дорожки из наклонных ступеней, обозначенные на рис. 2 как r' . При переходе от плоского формообразователя к конусному ширина этих дорожек убывает примерно в два раза. Кроме того, на кристалле, выращенном с плоского формообразователя, ступени огранены, и отражения от наклонных зеркальных участков дают четкий рефлекс в середине дорожки (рис. 1, *a*). Эти зеркальные участки хорошо видны на кристалле даже невооруженным глазом. Уменьшение угла конуса формообразователя приводит к тому, что рефлекс в середине дорожек на фотограммах становится менее четким (рис. 1, *b* и *c*). Это означает, что огранение ступеней уменьшается. На кристалле, выращенном с формообразователя с углом конуса 90° , эти дорожки визуально неразличимы.

В виде граней, параллельных направлению вытягивания, для этой ориентации могут проявляться грани трех простых форм: гексагональных призм $m\{10\bar{1}0\}$ и $a\{11\bar{2}0\}$ и семейства дигексагональных призм $\{hki0\}$. На всех выращенных кристаллах нами обнаружено присутствие ясно выраженных граней призмы a , причем ширина этих граней закономерно убывает при уменьшении угла конуса формообразователя (см. таблицу). На всех фотограммах также наблюдается 12 относительно слабых рефлексов, отмеченных на рис. 2 буквой d . По угловому положению они идентифицированы как отражения от граней дигексагональной призмы $\{14\bar{5}0\}$. Ширина этих граней мала. При сильном развитии дорожек r' (рис. 1, *a*) он частично маскирует рефлекс d . Отметим, что грани призмы a и дипризмы d обнаружены на профилированных монокристаллах впервые. Присутствие граней призмы m на наших кристаллах не установлено.

Приведенные результаты показывают, что развитие граней зависит от конструкции формообразователя и усло-

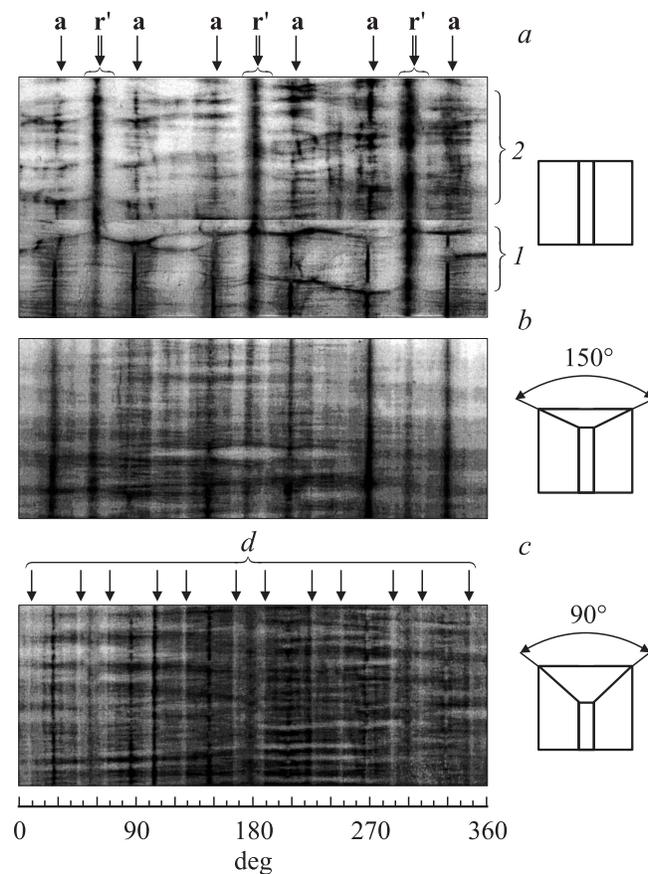


Рис. 2. Фотограммы боковой поверхности монокристаллов ориентации $[0001]$, выращенных с использованием формообразователей различной конструкции: *a* — с плоской верхней (рабочей) поверхностью, *b* и *c* — с конической поверхностью с углами конуса 150° и 90° соответственно. 1 и 2 — участки кристалла, выращивавшиеся с высоким и низким фронтом кристаллизации; *a* — рефлексы граней гексагональной призмы, r' — рефлексы от ступенчатых поверхностей, образующихся за счет проявления наклонных граней ромбоэдра на фронте кристаллизации, d — 12 рефлексов от граней дигексагональной призмы.

вий выращивания, размеры граней уменьшаются при переходе от плоского формообразователя к конусному и уменьшении угла конуса, а также при уменьшении высоты фронта кристаллизации. Установлено, что изменение скорости выращивания от 0.5 до 1.2 mm/min не приводит к какому-либо изменению ограничения боковой поверхности.

Фронт отрыва выращенных кристаллов всегда повторял форму рабочей поверхности используемого формообразователя: он был либо плоским, либо имел форму конуса. Для данной ориентации на нем всегда присутствовала грань базиса c (0001). Эта грань образовывала одну зеркальную поверхность для плоского формообразователя или ступенями покрывала коническую поверхность для формообразователей с углами 150 и 90°.

2. Ограничение боковой поверхности кристаллов сапфира ориентаций $[11\bar{2}0]$ и $[10\bar{1}0]$

Ориентация $[11\bar{2}0]$ дает уникальную возможность сравнения роста граней c и r , поскольку в этом случае обе грани ориентированы вдоль цилиндрической поверхности кристалла и в процессе роста находятся в одинаковых капиллярных и тепловых условиях. Изучалось ограничение специально выращенного для этой цели монокристалла диаметром 10 mm с предельно малой ошибкой ориентации (не более 3–5' по обеим граням). На фотограмме этого кристалла (рис. 3, *a*) проявляются четко выраженные рефлексы от двух граней базиса и двух граней ромбоэдра. Ширина этих граней оказалась различной на различных участках кристалла, но грань c всегда шире. Максимальные значения ширины составили ≈ 3 mm для грани c и ≈ 1.5 mm — для r . Таким образом, в первом приближении можно считать, что на этом кристалле грань базиса в два раза шире грани ромбоэдра.

На фотограмме этого кристалла наблюдается также значительное количество слабо выраженных рефлексов. Из кристаллографии сапфира ясно, что в рассматриваемой ориентации в качестве зеркальных граней кроме базиса c могут проявляться только грани семейства ромбоэдров $\{h0\bar{h}l\}$ (частный случай — основной морфологический ромбоэдр r). Указанные слабые рефлексы идентифицированы нами как принадлежащие формам s $\{20\bar{2}1\}$, t $\{40\bar{4}1\}$, q $\{20\bar{2}5\}$ и ряду ромбоэдров, не имеющих общепринятых обозначений и указанных на рис. 3, *a* цифрами: 1 — $\{40\bar{4}3\}$, 2 — $\{40\bar{4}5\}$, 3 — $\{40\bar{4}7\}$, 4 — $\{40\bar{4}1\}$, 5 — $\{10\bar{1}6\}$ и 5 — $\{10\bar{1}3\}$. Однако эти данные нужно рассматривать как предварительные, поскольку многие из этих рефлексов недостаточно четкие, что приводит к большим погрешностям в определении углов.

Аналогичную возможность сравнения граней c и a дает ориентация $[10\bar{1}0]$. Исследования ограничения были выполнены на кристалле диаметром 6.4 mm. Его фотограмма приведена на рис. 3, *b*. Присутствуют хорошо развитые грани базиса шириной до 0.7–0.8 mm и слабые

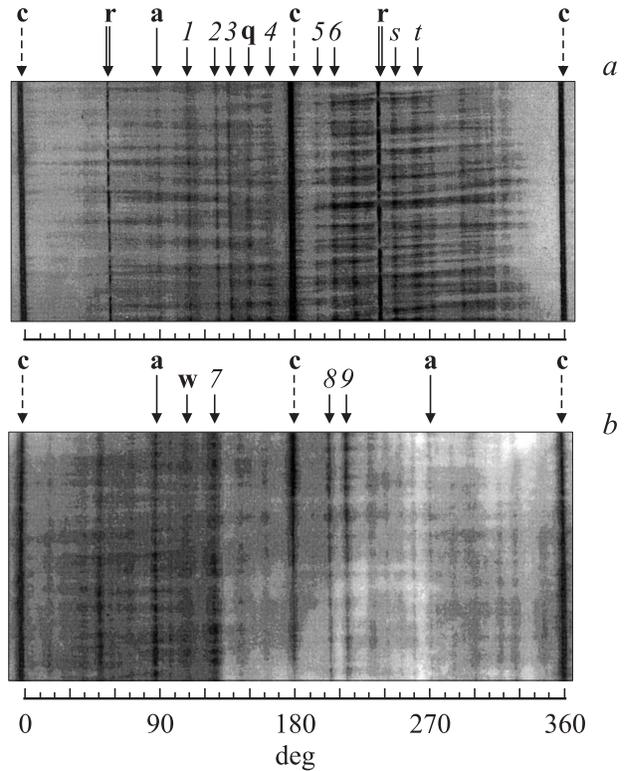


Рис. 3. Фотограммы боковой поверхности монокристаллов ориентаций $[11\bar{2}0]$ (*a*) и $[10\bar{1}0]$ (*b*). c, r и a — рефлексы от основных граней базиса, ромбоэдра и призмы соответственно. $s, t, q, w, 1-9$ рефлексы слабо выраженных граней (индексы простых форм, которым принадлежат эти грани приведены в тексте).

грани призмы a , ширина которых не превышает 0.1 mm. Таким образом, по огранке данного кристалла можно сделать вывод, что грань c в 7–8 раз шире грани a .

Как и в предыдущем случае, на фотограмме также наблюдается ряд слабо выраженных рефлексов. В соответствии с кристаллографией сапфира они могут принадлежать только семейству гексагональных бипирамид $\{hh2\bar{h}l\}$, причем каждый рефлекс должен повторяться на фотограмме четыре раза в симметричных положениях относительно отражений от граней c и a . На рис. 3, *b* отмечены рефлексы w — $\{11\bar{2}1\}$, а также 7 — $\{11\bar{2}2\}$, 8 — $\{11\bar{2}6\}$ и 9 — $\{11\bar{2}4\}$, от граней пирамид, не имеющих общепринятых обозначений. Так же, как и для слабых рефлексов на рис. 3, *a*, их идентификацию следует рассматривать как предварительную.

3. Структура слоев роста на зеркальных гранях

Микроскопическое исследование поверхностей зеркальных граней показало, что на них присутствуют слои роста, причем их структура на гранях c, r и a существенно различается.

Грань базиса с

На рис. 4, *a* показана часть поперечного сечения кристалла ориентации $[11\bar{2}0]$ в области грани с. Профиль кристалла снимался на микроскопе МИИ-4 следующим образом. Цилиндрический кристалл устанавливался на столике микроскопа так, чтобы исследуемая грань была обращена к объективу и располагалась по возможности горизонтально, а ось кристалла совпадала с одним из направлений перемещения столика. Микроскоп фокусировался до получения резкого изображения поверхности кристалла в центре поля зрения. Затем столик с кристаллом перемещался в направлении, перпендикулярном оси и вновь производилась фокусировка на поверхность кристалла в центре поля. Разность отсчетов микровинта перемещения объектива в этих двух положениях принималась за изменение координаты профиля кристалла. Цена делений барабана микровинта составляет 0.003 mm , что обеспечило высокую точность измерений. В ходе математической обработки результатов дополнительно исключалась систематическая ошибка, связанная с неточностью установки грани кристалла перпендикулярно оси объектива.

Из изображения профиля (рис. 4, *a*) видно, что в его центральной части имеется плоский участок *BC* зеркальной грани с отдельными ступенями (рис. 4, *b*), высота которых составляет $0.1\text{--}0.3 \mu\text{m}$. Высота ступеней измерялась по смещению интерференционных полос в микроскопе МИИ-4. В средней части микрофотографии (рис. 4, *b*) приведен пример интерференционной картины, на которой видны характерные изломы полос на ступенях. При изменении ширины грани отдельные ступени выклиниваются либо появляются вновь в виде треугольных островков, вытянутых в направлении выращивания. На краях зеркального участка грани плотность ступеней быстро возрастает, и грань переходит в ступенчатую поверхность *AB* или *CD* (рис. 4, *c* и *d*), постепенно выходящую на круговое сечение кристалла радиуса

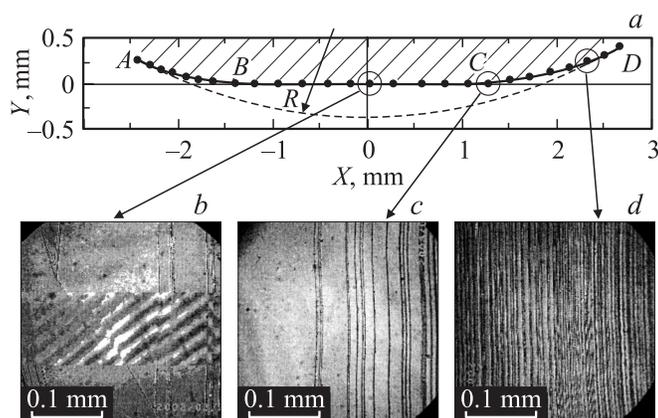


Рис. 4. Рельеф базисной грани с на кристалле ориентации $[11\bar{2}0]$; *a* — профиль кристалла в области грани, *b, c* и *d* — микрофотографии рельефа граней в указанных областях поверхности кристалла. В среднюю часть микрофотографии (*b*) вставлена интерференционная картина. $R = 5 \text{ mm}$ — радиус кристалла в неограниченной части.

$R = 5 \text{ mm}$. Поверхности ступеней являются участками грани с.

Грань призмы а

Структура этой грани изучалась на кристалле, выращенном в направлении $[0001]$ с использованием плоского формообразователя на участке с высоким фронтом кристаллизации. Подобно грани с, эта грань также состоит из плоского и двух ступенчатых переходных участков, как показано на рис. 5, *a*. Однако на ее плоской части имеется штриховка в виде горизонтальных полос с шагом около $2 \mu\text{m}$ (рис. 5, *b*). На краю плоского участка эти полосы переходят в короткие штрихи (рис. 5, *c*). Ступени переходных участков (рис. 5, *d*) имеют меньший шаг и более неровное очертание, чем ступени аналогичного участка грани с. На последней фотографии хорошо видны многочисленные пластинки молибдена, осаждающиеся на кристалл из газовой фазы выше фронта кристаллизации. Интересно отметить, что на зеркальном участке грани *a* выделения молибдена встречаются крайне редко. Как уже отмечалось при обсуждении фотограмм, на участке кристалла, выращенном с низким фронтом кристаллизации, зеркальная грань *a* проявляется лишь в виде отдельных фрагментов, однако ее ступенчатые участки наблюдаются по всей длине кристалла. На кристаллах, выращенных с использованием формообразователей с конической поверхностью, грань призмы имеет несколько отличающееся строение. При вдвое меньшей ширине зеркального участка (менее 0.3 mm) ее полная ширина с переходными областями примерно такая же, как и при использовании плоского формообразователя — около 2 mm .

По микрофотографиям ступенчатых переходных областей граней с и *a* было измерено среднее расстояние между ступенями (рис. 6). Оказалось, что по мере удаления от зеркального участка это расстояние закономерно убывает. На этом же рисунке приведены значения

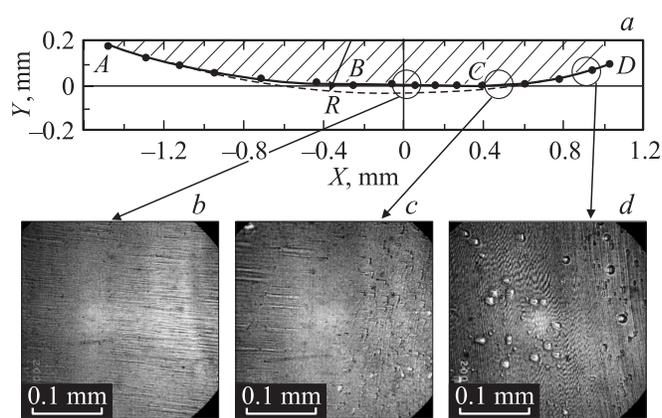


Рис. 5. Рельеф грани призмы *a* на кристалле ориентации $[0001]$ (участок с высоким фронтом кристаллизации). *a* — профиль кристалла в области грани, *b, c* и *d* — микрофотографии рельефа граней в указанных областях поверхности кристалла. $R = 4.6 \text{ mm}$ — радиус кристалла в неограниченной части.

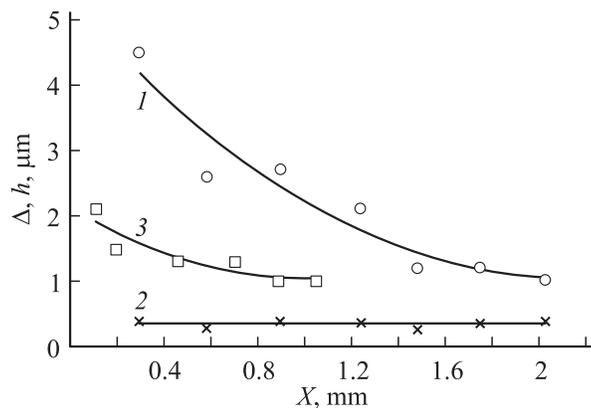


Рис. 6. Средний шаг Δ и средняя высота h ступеней на переходных участках для граней c и a : 1 — Δ для грани c , 2 — h для грани c , 3 — Δ для грани a . Точки — эксперимент, кривые — аппроксимация полиномом второй степени. Координата x отсчитывается вправо от точки c (см. рис. 4, a и 5, a).

средней высоты ступеней на грани c . Видно, что высота ступеней практически не изменяется.

Грань ромбоэдра g

Эта грань (рис. 7) изучалась на кристалле ориентации $[11\bar{2}0]$. Грань состоит из отдельных зеркальных участков, разделенных дугообразными ступенями, обращенными выпуклостью в направлении выращивания. Высота ступеней лежит в пределах $0.4\text{--}1.6\ \mu\text{m}$. Более тонких слоев, в пределах разрешения оптического микроскопа, на грани g не наблюдается. Ширина этой грани изменяется в значительных пределах, следуя, по-видимому, небольшим изменениям диаметра кристалла.



Рис. 7. Рельеф грани ромбоэдра g на кристалле ориентации $[11\bar{2}0]$. Стрелкой указано направление вытягивания.

На краях эта грань переходит в округлую неограниченную поверхность, без какого-либо ступенчатого переходного участка.

Обсуждение результатов

Результаты изучения ограничения боковой поверхности цилиндрических монокристаллов сапфира кристаллографических ориентаций $[11\bar{2}0]$ и $[10\bar{1}0]$ позволяют сделать вывод, что по величине (ширине) наблюдаемые грани могут быть выстроены в ряд от больших размеров к меньшим в порядке $c > g > a$, или в индексах граней $\{0001\} > \{10\bar{1}1\} > \{11\bar{2}0\}$. Примерное соотношение размеров (по ширине) указанных граней можно оценить как $8 : 4 : 1$. Кроме того, наблюдаются весьма узкие грани дипризмы, нескольких ромбоэдров и бипирамид, регистрируемые только как слабые рефлексы на фотограммах. Таким образом, можно предположить, что в условиях выращивания профилированных кристаллов форма роста сапфира составлена в основном гранями базиса, ромбоэдра и призмы с ведущей ролью грани c .

Представляет интерес сопоставить эти результаты с другими известными данными по ограничению сапфира. На монокристаллах, выращенных из расплава как способом Степанова, так и другими методами, ранее отмечалось присутствие граней c и g , однако какие-либо данные о количественном соотношении размеров граней отсутствуют.

Из имеющихся количественных данных наиболее близкими к нашему случаю можно считать результаты, полученные на кристаллах, выращенных раствор-расплавным методом. В [8] на основе изучения габитуса кристаллов сапфира, выращенных из раствора-расплава Al_2O_3 в $\text{PbF}_2\text{--Bi}_2\text{O}_3$ установлена следующая последовательность развития граней: $c > g > R > a$, причем грани малого ромбоэдра $R \{01\bar{1}2\}$ и призмы a проявлялись только при введении малых добавок La_2O_3 .

В работе [9] кристаллы сапфира выращивались из растворов-расплавов PbF_2 и $\text{PbO--B}_2\text{O}_3\text{--PbF}_2$ в условиях направленной кристаллизации на затравку. По величине выросшего слоя было установлено следующее соотношение скоростей роста: $20 : 10 : 8 : 6 : 1$ в ряду граней a, g, n, R, c , где $n \{22\bar{4}3\}$ — дигексагональная пирамида. (Как известно, соотношение скоростей роста обратно соотношению размеров граней.)

Отметим, что в обоих приведенных примерах выполняется установленное нами соотношение $c > g > a$. Появление граней R и n и отличия в численных характеристиках размеров граней, по-видимому, связаны с тем, что равновесные формы для условий выращивания из расплава и раствора-расплава несколько отличаются. Дело в том, что равновесная форма кристалла отражает анизотропию свободной поверхностной энергии кристалла, которая, как и любая термодинамическая функция, зависит от температуры, давления, химического и фазового состава системы.

В этом отношении интересно также сопоставить наши результаты с расчетными значениями удельной свободной поверхностной энергии. Для кристалла сапфира такие расчеты были выполнены в работе [10], и по полученным значениям энергий можно ожидать следующего соотношения между размерами граней:

$$c > m > R > a > r.$$

С нашими данными здесь коррелирует только ведущая роль грани базиса. По-видимому, условия расчета из первых принципов в [10] все же далеки от условий формирования граней при росте из расплава.

В работе [11] на основании изучения цепочек связей между атомами с использованием метода работ отрыва построена последовательность граней в порядке убывания их значимости для различных типов кристаллических решеток. Полученный ряд граней для плотнейшей гексагональной упаковки имеет вид

$$c > r > m > a > R.$$

Здесь согласие с полученным нами соотношением $c > r > a$ даже несколько лучше, хотя расчеты [11] выполнены для упаковки атомов одного вида. Возможно, сказывается то обстоятельство, что упаковка крупных ионов кислорода в решетке сапфира близка к плотнейшей гексагональной.

Заключение

1. Метод фотогониографии может быть успешно использован для изучения огранения цилиндрических монокристаллов сапфира.

2. В огранении боковой поверхности профилированных монокристаллов сапфира принимают участие в основном грани базиса (c), ромбоэдра (r) и призмы (a), причем по относительной ширине они могут быть выстроены в ряд $c > r > a$ в соотношении 8 : 4 : 1.

3. При переходе от плоской рабочей поверхности формообразователя к конической развитие граней на боковой поверхности монокристаллов сапфира уменьшается, что приближает форму кристаллов к цилиндру, задаваемому формообразователем.

4. Грани c и a имеют сложное строение. К центральной зеркальной части этих граней примыкают ступенчатые переходные области, переходящие в неограниченную цилиндрическую поверхность. Для грани r таких областей не наблюдается.

Авторы выражают искреннюю благодарность Антонову П.И. и Никанорову С.П. за поддержку работы и полезные обсуждения, а также Москалеву А.В. за помощь в проведении экспериментов.

Список литературы

- [1] Антонов П.И., Григорьев Н.С., Вахмянин Л.П. // Изв. ФН СССР. Сер. физ. 1972. Т. 36. № 3. С. 501–506.
- [2] Антонов П.И., Бахолдин С.И., Крымов В.М. и др. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2001. № 10. С. 21–27.
- [3] Антонов П.И., Крымов В.М., Носов Ю.Г., Шульпина И.Л. // Изв. АН. Сер. физ. 2004. Т. 68. № 6. С. 777–783.
- [4] Крымов В.М., Юфреве В.С. // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2005. № 11. С. 53–60.
- [5] Антонов П.И., Крымов В.М., Москалев А.В. // Наука — производству. 2005. № 2. С. 36–38.
- [6] Ландсберг Г.С. Оптика. М.: Наука, 1976. 926 с.
- [7] Рубин и сапфир. М.: Наука, 1974. 236 с.
- [8] Chase A.B. // J. Amer. Ceram. Soc. 1966. Vol. 49. N 5. P. 233–236.
- [9] Тимофеева В.А., Лукьянова Н.И. // Кристаллография. 1967. Т. 12. Вып. 1. С. 98–103.
- [10] Mackrodt W.C. // Phil. Trans.: Phys. Sci. and Engin. 1992. Vol. 341. N 1661. P. 301–312.
- [11] Чернов А.А., Гиваргизов Е.И., Багдасаров Х.С. и др. // Современная кристаллография. 1980. Т. 3. С. 170.